UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

ÉCOLE DOCTORALE DE SCIENCES ET TECHNOLOGIES

Institut de combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement

THÈSE présentée par :

Amir MZE AHMED

Soutenue publiquement le 11 Octobre 2011

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline : Chimie-Physique

Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles − Formation de polluants

THÈSE dirigée par :

P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans

RAPPORTEURS :

J. M. MOST	Directeur de recherche au CNRS de Poitiers
E. THERSSEN	Professeur à l'Université de Lille I

JURY:

J. M. MOST	Directeur de recherche au CNRS de Poitiers
E. THERSSEN	Professeur à l'Université de Lille I
P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans
G. DAYMA	Maître de Conférences à l'Université d'Orléans
M. SICARD	Ingénieur de recherche, ONERA
M. YAHYAOUI	Ingénieur de recherche, EADS

AVANT-PROPOS

Cette étude a été financée par le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche et effectuée au sein de l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (ICARE) à Orléans, sous la direction de Monsieur Philippe Dagaut, Directeur de Recherche au CNRS.

Je remercie tout particulièrement Monsieur Philippe Dagaut de m'avoir encadré durant ces 3 années de thèse. Sa confiance et son expérience m'ont permis de faciliter mon intégration et de mener à bien mes travaux de recherches. Un grand merci à lui.

Je tiens également à remercier Monsieur Iskender Gökalp, Directeur de l'Institut de m'avoir accueilli au sein du laboratoire.

Je souhaite remercier Monsieur Eric Therssen, Professeur à l'Université de Lille I et Monsieur Jean-Michel Most, Directeur de recherche à l'Université de Poitiers d'avoir consacré une partie de leurs temps aux rapports de ce travail. Mes remerciements vont aussi aux autres membres du jury.

Un grand Merci à Casimir Togbé, Pascal Diévart, Kamal Hadj-Ali et Guillaume Dayma, avec qui j'ai travaillé. Leurs soutiens et précieux conseils m'ont beaucoup aidé et permis d'avancer dans mes travaux.

Je remercie tout le personnel du laboratoire. Merci également à tous mes collègues et amis : K. Coudoro, J. Sabard, M-M. Ndem, A. Matynia, J. Molet, M. Chahine, J-B May Carle, H. Ramirez, Y. Eude, P. Escot, J. Goulier, F. Gourmel, M. Lendar, F. Karsenty, M. Cazaunau, A. Elzein, M. Karaca, D. Le Ny, E. Bonifaci, C. Roche et ceux que j'oublie.

Merci aussi à tous ceux que j'ai rencontré : Fabien, Thomas, Rémy, Ludovic, Homan, Peng…

Enfin, je dédie ce travail à toute ma famille et particulièrement à mes parents qui m'ont énormément soutenu. Merci à eux.

SOMMAIRE

1 Contexte de l'étude 11

1.1 Les contraintes de notre système énergétique 11

1.1.1 Économiser le pétrole 11

1.1.2 Le réchauffement climatique 13

1.1.3 La pollution atmosphérique liée au transport aérien 19

1.2 Le carburéacteur : Kérosène 24

1.2.1 Origine et généralités 24

1.2.2 Composition chimique du kérosène 25

1.3 Les carburants reformulés 27

1.3.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch 27

1.3.2 Composition chimique 30

1.3.3 Les biocarburants ou agrocarburants 31

1.4 Objectifs 32

1.5 Conclusion 33

Références bibliographiques 35

2 Étude bibliographique 43

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 43

2.1.1 Domaine de basse température 44

2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT) 46

2.1.3 Domaine de haute température 48

2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation du kérosène 49

2.2.1 Études expérimentales 49

2.2.2 Mécanismes cinétiques 55

2.3 État de l'art sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions 57

2.3.1 Oxydation du n-décane 58

2.3.2 Oxydation du n-undécane 64

2.3.3 Oxydation du n-dodécane 64

2.3.4 Oxydation du n-tétradécane 68

2.3.5 Mécanismes cinétiques pour l'oxydation d'alcanes lourds 68

2.4 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés 72
2.4.1 Études expérimentales 72
2.4.2 Mécanismes cinétiques 77
2.5 Conclusion 80
Références bibliographiques 81
3 Dispositif expérimental 99
3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) 100
3.1.1 Principe du réacteur auto-agité 100
3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux 100
3.1.3 Calculs des débits gazeux 103
3.1.4 Prélèvements des gaz de combustion 104
3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion 105
3.2.1 Analyse par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier 106
3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse 108
3.3 Incertitudes sur les résultats 111
3.4 Conclusion 112
Références bibliographiques 113
4 Modélisation 117
4.1 Le logiciel CHEMKIN 118
4.1.1 Le mécanisme réactionnel 119
4.1.2 Les données thermodynamiques 119
4.1.3 Le code de calcul Performed Stirred Reactor 120
4.2 Les Mécanismes cinétiques 123
4.2.1 Sous mécanismes C_0-C_4 124
4.2.2 Mécanisme d'oxydation du kérosène 124
4.2.3 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures lourds 125
4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes reformulés et de synthèse 137
4.3 Conclusion 144
Références bibliographiques 145
5 Résultats expérimentaux et validation des modèles cinétiques . 153
5.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 153

5.1.1 Conditions expérimentales 153
5.1.2 Résultats expérimentaux 154
5.1.3 Confrontation expérience-modèle 155
5.1.4 Analyse de sensibilité 160
5.2 Étude cinétique de l'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions 164
5.2.1 Oxydation du n-undécane et validation du modèle 164
5.2.2 Oxydation du n-dodécane et validation du modèle 178
5.2.3 Comparaison entre le modèle développé, un modèle issu de la littérature et les résultats expérimentaux obtenus en milieu stoechiométrique 192
5.2.4 Oxydation du n-tétradécane 195
5.2.5 Étude comparative entre l'oxydation des hydrocarbures lourds 204
5.2.6 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du n-undécane à $\Phi = 1$ 205
5.3 Étude cinétique de l'oxydation de kérosènes reformulés 207
5.3.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, en masse) 208
5.3.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10 en masse) à $\Phi = 1$ 218
5.3.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1/RME (90/10, m/m) 220
5.3.4 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/RME (90/10 en masse) à $\Phi = 1$ 229
5.4 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation de kérosènes de synthèse 231
5.4.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur, SPK (IFP) 232
5.4.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du kérosène de synthèse SPK, à $\Phi = 1$ 241
5.4.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1/kérosène de synthèse SPK (50/50, en masse) 242
5.4.4 Études expérimentales et modélisation des oxydations des kérosènes de synthèse GTL (Gas To Liquid) et CTL (Coal To Liquid) 247
5.4.5 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et des carburéacteurs de synthèse GTL (Shell), CTL (Sasol) 257
5.4.6 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange GTL /hexan-1-ol (80/20, v/v) 260

5.4.7 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène de synthèse GTL (Shell) et d'un mélange GTL(Shell)/hexan-1-ol (80/20, v/v) 266

5.5 Conclusion 268

Références bibliographiques 269

6 Conclusion générale 273

Références bibliographiques 279

7 ANNEXES 281

Références bibliographiques 291

CHAPITRE 1 :

CONTEXTE DE L'ÉTUDE

1 Contexte de l'étude 11

1.1 Les contraintes de notre système énergétique 11

1.1.1 Économiser le pétrole 11

1.1.2 Le réchauffement climatique 13

1.1.3 La pollution atmosphérique liée au transport aérien 19

1.2 Le carburéacteur : Kérosène 24

1.2.1 Origine et généralités 24

1.2.2 Composition chimique du kérosène 25

1.3 Les carburants reformulés 27

1.3.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch 27

1.3.2 Composition chimique 30

1.3.3 Les biocarburants ou agrocarburants 31

1.4 Objectifs 32

1.5 Conclusion 33

Références bibliographiques 35

1 Contexte de l'étude

1.1 Les contraintes de notre système énergétique

1.1.1 Économiser le pétrole

L'augmentation de la population, la croissance économique et l'évolution technologique au cours de ces dernières années sont des facteurs essentiels de la croissance de la demande énergétique mondiale. Le pétrole étant l'énergie primaire la plus consommée dans le monde, sa préservation fait l'objet d'une attention particulière. Durant le XX^{e} siècle on a pu observer une nette augmentation de la consommation de pétrole. Comme on peut le voir sur la figure ci-dessous (Figure I.1), la demande mondiale de pétrole brut a fortement augmenté après le deuxième choc pétrolier (1979-1984).

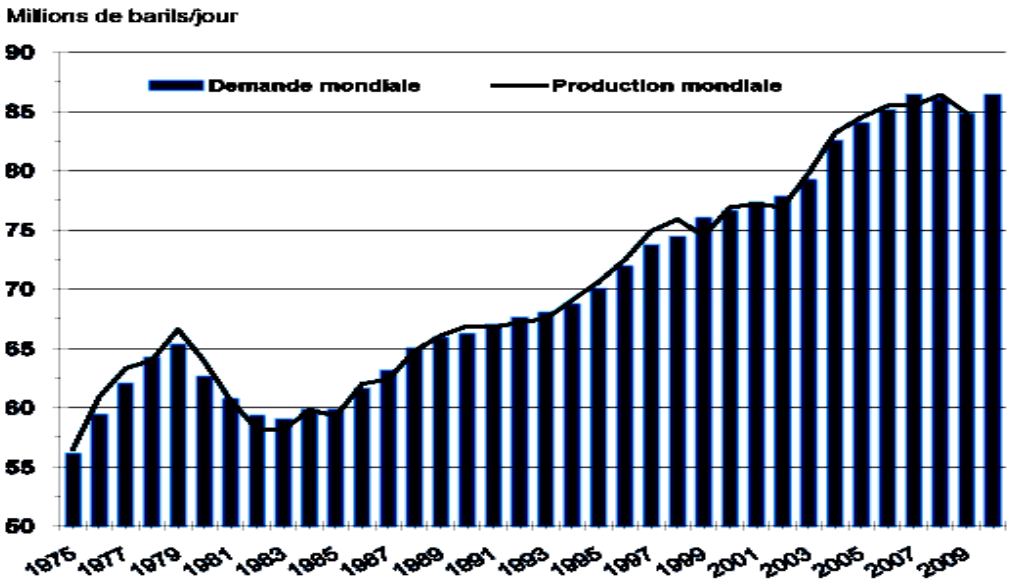


Figure I.1 : Evolution de la demande et de la production de pétrole brut dans le monde (source, *UFIP, d'après l'AIE* [1])

Cette hausse de la demande globale de pétrole s'explique en grande partie par l'évolution du secteur des transports et particulièrement dans les pays membre de l'OCDE (Organisation de Coopération et de Développement Economiques).

Le pétrole n'étant pas une énergie renouvelable, pour éviter une pénurie de nos approvisionnements pétroliers et des tensions liées au prix du pétrole, on doit limiter nos consommations d'énergie. Comme vu précédemment, le secteur des transports est le secteur principal dans l'utilisation des produits pétroliers. Des mesures doivent donc être prises pour résoudre le problème concernant les menaces sur les réserves de pétrole.

1.1.1.1 Cas du kérosène

Le kérosène est le carburant utilisé dans le secteur aéronautique. Le transport aérien est international et consomme énormément d'énergie. Selon l'organisation commerciale internationale de sociétés de transport aérien l'IATA (International Air Transport Association), il a transporté en 2007 environ 2,2 milliards de passagers [2].
Le tableau ci-dessous indique la consommation du kérosène par jour dans le monde entre 2003 et 2009.

Pays	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009
Etats-Unis	20,034	20,731	20,802	20,687	20,680	19,498	**18,686**
Chine	5,578	6,437	6,695	7,263	7,582	7,831	**8,200**
Japon	5,427	5,318	5,328	5,197	5,036	4,785	**4,363**
Russie	2,682	2,751	2,785	2,872	2,857	2,916	**2,850**
Allemagne	2,679	2,665	2,647	2,692	2,471	2,569	**2,437**
Inde	2,346	2,430	2,512	2,691	2,845	2,962	**2,980**
Canada	2,217	2,310	2,342	2,253	2,306	2,254	**2,151**
Corée du Sud	2,175	2,155	2,191	2,180	2,241	2,175	**2,216**
Brésil	2,056	2,123	2,206	2,287	2,362	2,485	**2,460**
France	2,001	2,009	1,991	1,985	1, 968	1,986	**1,875**
Arabie Saoudite	**1,775**	**1,884**	**1,964**	**2,020**	**2,218**	**2,376**	**2,430**

Tableau 1.1 : Consommation mondiale de Kérosène en Milliers de barils/jour, *selon l'U.S. Energy Information Administration, 2010* [3])

En 2007, la consommation mondiale de kérosène a atteint le chiffre de 1,9 milliard de barils soit 216Mt. Aujourd'hui la demande mondiale de kérosène est de 5 millions de barils par jour, ce qui correspond à environ 6% de la consommation mondiale de pétrole [4].

Les États-Unis sont les premiers consommateurs dans le monde. Ils consomment à peu près 37% du total mondial [5].

1.1.2 Le réchauffement climatique

1.1.2.1 L'effet de serre naturel

Les gaz atmosphériques tels que le dioxyde de carbone CO_2 et le méthane CH_4 absorbent la majeure partie du rayonnement infrarouge émis par la Terre (sol chauffé) pour ensuite le réémettre à la surface. Ce phénomène naturel est appelé effet de serre et permet de maintenir la température moyenne de la Terre à environ +15°C. Sans ce processus, la température moyenne de notre planète serait située autour de -18°C. Par conséquent l'effet de serre permet de maintenir une température confortable indispensable à la vie sur la Terre.

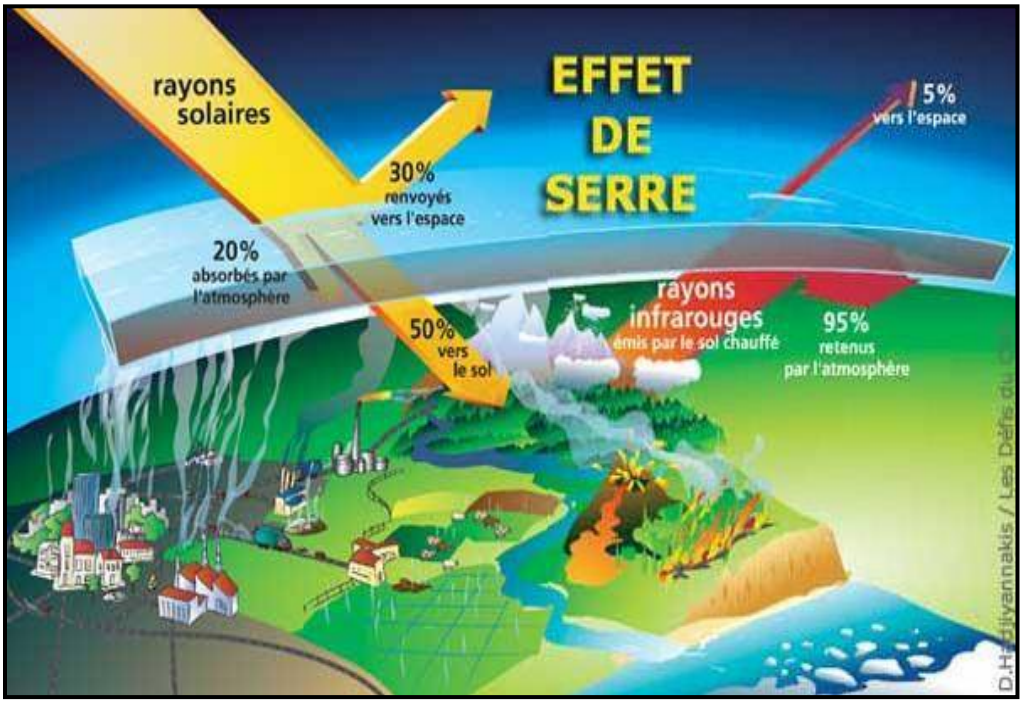


Figure I.2 : Principe de l'effet de serre naturel

Le dioxyde de carbone et le méthane ne sont pas les seuls gaz atmosphériques qui jouent un rôle dans l'effet de serre naturel. On observe la présence de molécules telles que l'eau, H_2O, le protoxyde d'azote, N_2O, et l'ozone, O_3. Chaque composé est caractérisé par son

propre pouvoir de réchauffement global PGR (Tableau I.2). Cet indicateur est défini comme étant la puissance radiative que le composé renvoie sur le sol cumulée sur une durée de 100 ans. Il est exprimé en « équivalent CO_2 ». Le CO_2 est le composé de référence avec un PGR fixé à 1. Le méthane a un PGR plus important que le dioxyde de carbone mais sa durée de vie dans l'atmosphère est largement plus faible.

Composé	**CO_2**	**CH_4**	**N_2O**	**SF_6**
PGR	**1**	**25**	**298**	**22800**

Tableau I.2: Pouvoir de Réchauffement Global (PGR) des principaux gaz à effet de serre (*GIEC 2007* [6])

La vapeur d'eau est responsable de plus de la moitié de ce phénomène. Suivent les gaz à effets de serre (GES) puis les nuages.

1.1.2.2 L'effet de serre anthropique

Les activités humaines et en particulier la combustion de matière carbonée fossile, telle que la combustion d'hydrocarbures, se déroulant dans une chambre de combustion d'un moteur à combustion interne (turboréacteur, moteur automobile) contribuent au réchauffement climatique de notre planète. En effet certains produits formés lors d'un processus d'oxydation de combustibles fossiles sont considérés comme étant des gaz à effet de serre. Ces polluants, résultant des activités humaines ont pour conséquence directe d'augmenter la quantité de GES présente dans l'atmosphère terrestre. D'où un accroissement de l'effet de serre de la planète. C'est par exemple le cas du dioxyde de carbone qui est un produit de combustion et qui présente entre autre une longue durée de vie dans l'atmosphère.

On a vu plus haut que la molécule d'eau est un GES naturel. Mais l'accroissement de la température due aux activités humaines engendre une augmentation de la quantité de vapeur d'eau dans l'atmosphère ce qui a pour conséquence de provoquer une nouvelle élévation de la température du globe. C'est la « rétroaction positive de la vapeur d'eau » sur le réchauffement climatique.

Comme indiqué précédemment, le secteur des transports est en majeur partie responsable des menaces sur les réserves pétrolières. Il est également le principal émetteur de gaz à effet de serre dans le monde.

En France les transports sont responsables de 26% des émissions de CO_2 (Figure I.3). Ils devancent ainsi les secteurs de l'industrie, de l'agriculture et le résidentiel.

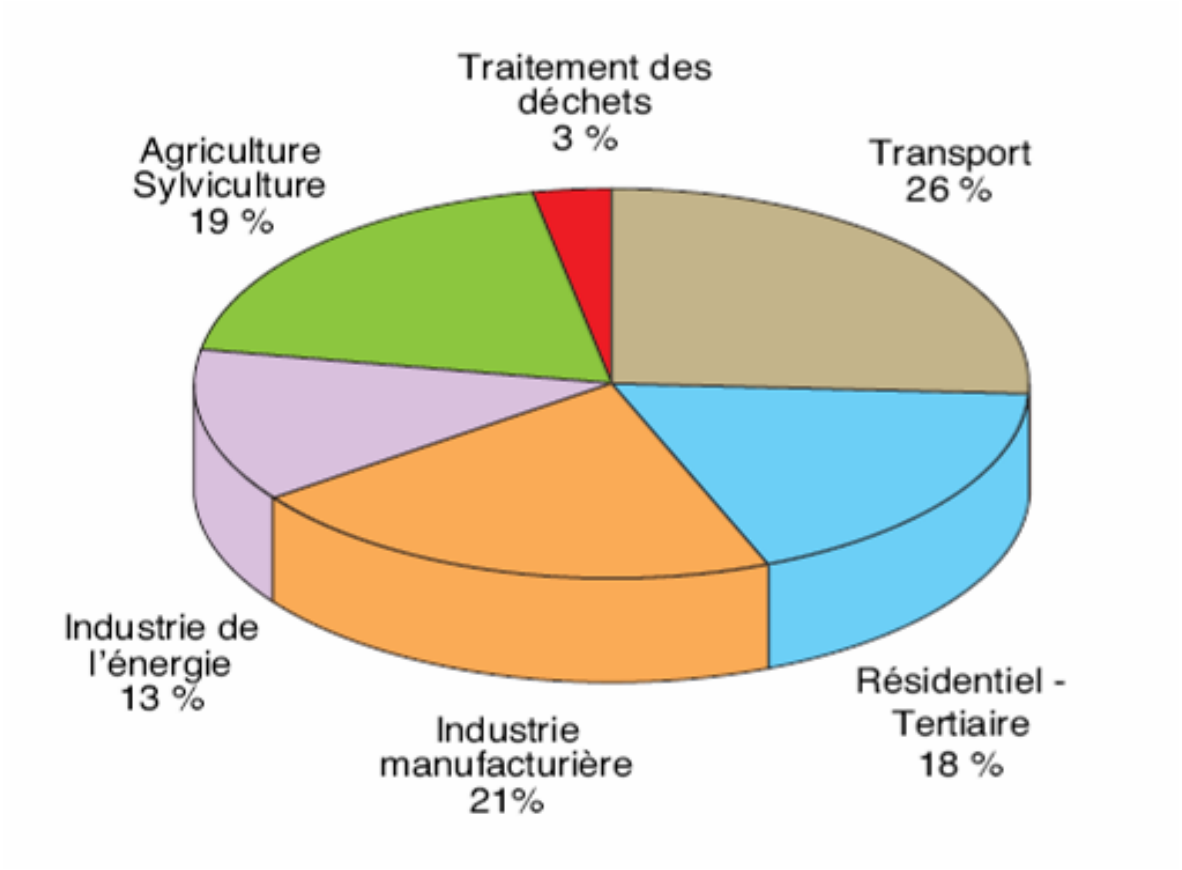


Figure I.3: Les émissions de CO_2 en France en 2005 [7]

Les secteurs des transports principalement responsables des émissions de CO_2 sont le transport routier avec une part de 85% et le transport aérien avec une part de 14%. (cf. Figure I.4). Ces chiffres sont dus à un parc automobile immense et au récent développement du trafic aérien.

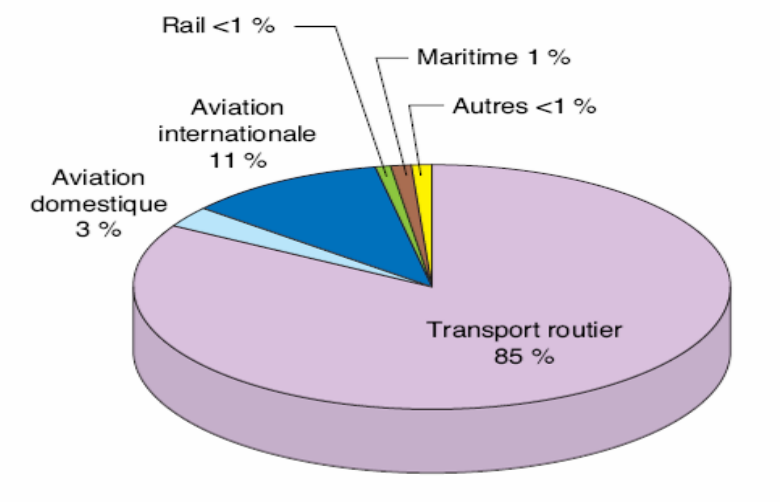


Figure I.4 : Les émissions françaises en CO_2 dans les transports en 2005 [7]

1.1.2.3 Cas du transport aérien

Dans le cas du transport routier, on peut observer un léger ralentissement de l'accroissement des rejets de dioxyde de carbone dans les pays développés grâce notamment aux progrès technologiques. Cependant, les émissions de CO_2 liées au secteur de l'aviation ne cessent d'augmenter. Elles se sont accrues de 87% depuis 1990. Le fort développement du trafic aérien mondial en est la première cause. En ce qui concerne le domaine de l'aviation, la part des émissions de dioxyde de carbone CO_2 dans le secteur des transports est de 12%.

La figure ci-dessous (Figure I.5) présente l'évolution des émissions de CO_2 liées au transport aérien.

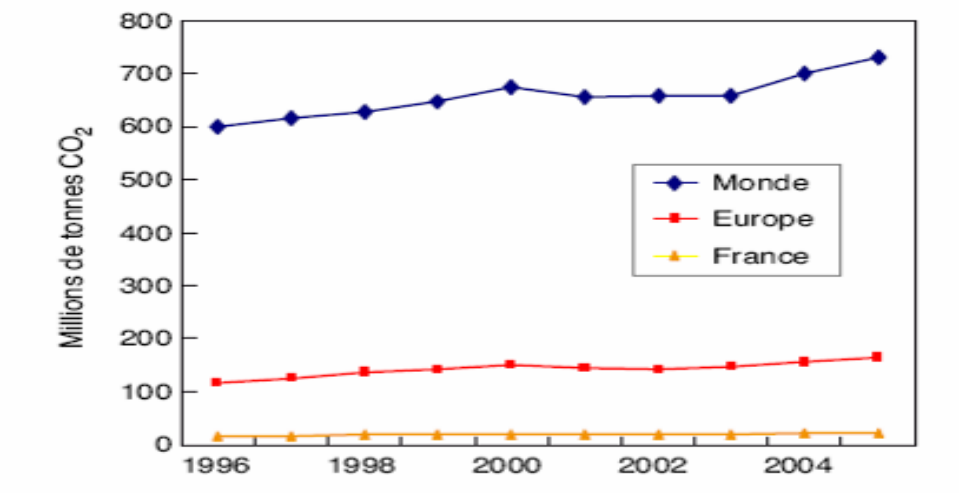


Figure I.5 : Evolution des émissions CO_2 dues au transport aérien [7])

En 2005 les émissions mondiales de CO_2 du transport aérien ont dépassé le stade de 700 millions de tonnes (Figure I.5). Le Comité de protection de l'environnement en aviation (CAEP) estime que les émissions dépasseront le milliard de tonnes d'ici 2020. Aujourd'hui l'aviation est responsable de 2,6% des émissions globales de CO_2 [8]. Ce chiffre risque d'augmenter jusqu'à 3,2% d'ici 2020 [9].

Depuis 1850 jusqu'à nos jours, on a pu remarquer une augmentation de la teneur en CO_2 dans l'atmosphère terrestre (Figure I.6). De la même manière, la température moyenne du globe a augmenté.

Une corrélation peut être admise entre la température moyenne et la concentration en CO_2 dans l'atmosphère. Ainsi, les GES liés aux activités humaines (transports, industries, élevage…) contribuent aux changements climatiques.

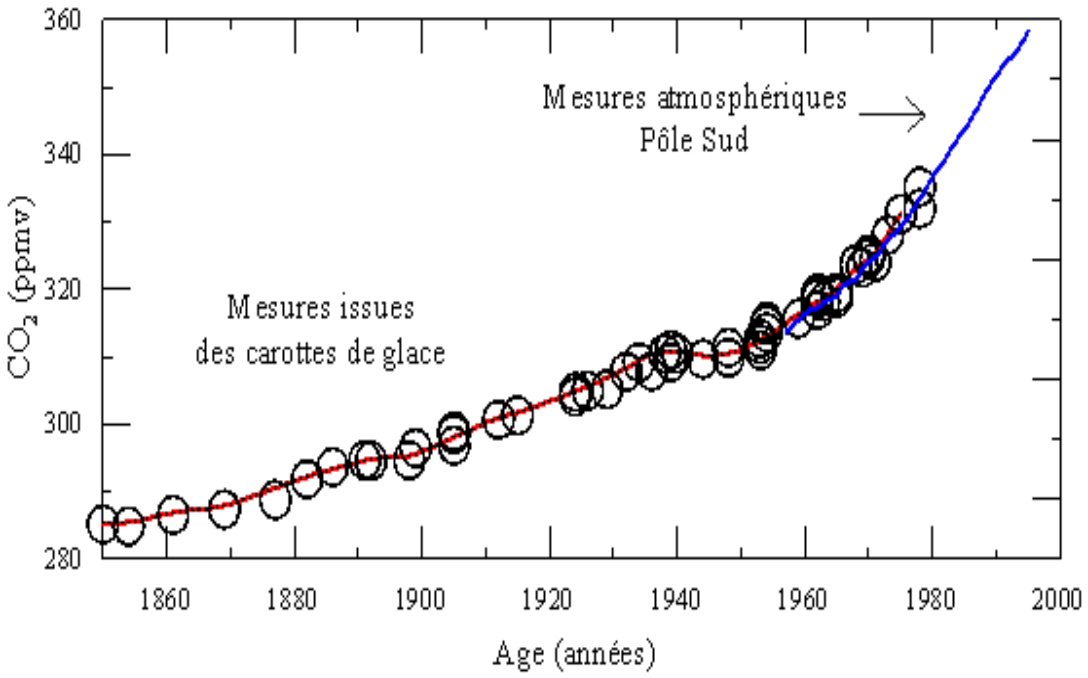


Figure I.6: Courbe d'évolution du CO_2 depuis 1850 à partir des analyses de carottes de glace antarctiques [10]

Les aéronefs ont aussi un impact sur la formation d'ozone, O_3, de traînées de condensation et l'augmentation de la nébulosité en cirrus. Il en résulte une amplification de l'effet de serre. Selon le Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Evolution du Climat (GIEC), ces appareils sont responsables de 3% du forçage radiatif total issus de toutes les

activités anthropogènes. Ce pourcentage n'inclut pas l'action des aéronefs sur la nébulosité en cirrus qui contribue aussi à l'effet de serre.

Le réchauffement climatique résultant des émissions anthropiques (telles que la hausse du CO_2 liée aux activités humaines) aura des conséquences néfastes sur la biodiversité des écosystèmes. Il contribuera au retrait des glaciers, à une accélération de la fonte de la banquise, à une élévation du niveau moyen des océans et à une modification de la circulation des courants marins. Il pourrait de plus provoquer une augmentation de la fréquence et de l'intensité de phénomènes climatiques tels que les cyclones, les ouragans, les inondations et la sécheresse.

Les océans sont les principaux puits de carbone. Ils vont absorber une bonne partie du CO_2 atmosphérique (d'origine naturel et anthropique) entraînant une diminution du pH des océans. Cette acidification des océans sera problématique pour les espèces marines.

1.1.2.4 Lutte contre les émissions de gaz à effet de serre

Dans le cadre de la Convention Cadre des Nations Unies sur les Changements Climatiques (CCNUCC), des mesures ont été prises pour lutter contre le réchauffement climatique engendré par les émissions de gaz à effet de serre. Le protocole de Kyoto a été signé le 11 décembre 1997 et vise à réduire considérablement les GES d'ici 2012. En effet les 172 pays ayant ratifiés le protocole doivent réduire de 5,2% leurs rejets de GES par rapport à leur niveau de 1990. Les Etats-Unis (1er pays émetteur) n'ont toujours pas ratifié le protocole.

Cependant un autre problème subsiste car les rejets de GES du transport aérien sont exclus du domaine d'application du protocole de Kyoto. Pour remédier à ce problème, le 8 juillet 2008 l'Union Européenne a décidé d'inclure le secteur aérien dans le système communautaire d'échange de quotas d'émissions (SCEQE). Les émissions de GES provenant de l'aviation seront prises en compte par le système à partir du 1er janvier 2012. Le SCEQE est le principal outil de l'UE dans sa politique de réduction des émissions GES. En effet l'Union Européenne joue un rôle dans la recherche aéronautique. Le groupe ACARE (Advisory Council for Aeronautics Research in Europe) a pour mission de réduire de 50% les émissions de CO_2 d'ici 2020 (la référence étant la situation en 2000) [11].

La conférence de Bali qui eu lieu en décembre 2007 avait pour objectif d'appliquer une feuille de route pour envisager l'après Kyoto, qui prend fin en 2012. En décembre 2009, les

pays présents au sommet de Copenhague espéraient trouver un accord international pour lutter contre le réchauffement climatique et fixer de nouveaux objectifs, telle que la réduction de la moitié des rejets de GES d'ici 2050 par rapport à ceux de 1990. Mais ce sommet fut un échec. De nouvelles négociations sur le climat ont eu lieu à Cancun au Mexique entre le 29 novembre et le 10 décembre 2010. Cette conférence rassemblait 192 états.

L'objectif de ces accords internationaux est la réduction de la hausse de la température de la Terre et ses répercussions sur la santé et l'environnement. Le développement de nouveaux types de carburants (carburants de synthèses et carburants issus de la biomasse) est primordial afin de lutter contre les émissions de gaz à effet de serre provenant des transports.

1.1.3 La pollution atmosphérique liée au transport aérien

Non seulement les transports sont les premiers responsables des émissions de gaz à effet de serre dans l'atmosphère, mais ils participent aussi aux émissions polluantes à l'origine de la pollution de l'air ambiant. Ces polluants ont un impact néfaste sur l'environnement et sur la santé.

En effet les gaz d'échappements issus des moteurs automobiles sont en grands partis responsables de la pollution atmosphérique. A l'heure actuelle, les moteurs Diesel sont les plus majoritaires dans le monde. Ils contribuent fortement aux émissions polluantes dans notre atmosphère. Cependant, outre la participation des composés polluants issus du transport routier, on recense aussi les émissions polluantes provenant du transport aérien. Ainsi l'explosion du trafic aérien ces dernières années et les estimations de la croissance de ce type de transport impliquent une limitation des rejets de polluants dans l'air par les compagnies aériennes.

1.1.3.1 Les polluants liés au transport aérien

Outre les émissions de gaz à effet de serre, on distingue des rejets de polluants primaires tels que les oxydes d'azotes (NO_x), le monoxyde de carbone (CO), les hydrocarbures imbrûlés (HC), les particules de suies et le dioxyde de soufre (SO_2).

Les oxydes d'azotes issus des aéronefs sont considérés comme étant des polluants majoritaires. Le monoxyde d'azote NO est formé à haute température et à haute pression selon le mécanisme du NO thermique [12]

$$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$$

$$N + O_2 \rightleftharpoons NO + O$$

$$N + OH \rightleftharpoons NO + H$$

et le mécanisme du NO précoce de Fenimore [13]:

$$CH + N_2 \rightleftarrows HCN + N$$

On notera qu'aujourd'hui, on considère plutôt la formation initiale de NCN :

$$CH + N_2 \rightleftarrows NCN + H$$

L'oxydation de NCN forme NO :

$$NCN+O \rightleftarrows CN+NO$$

$$NCN+OH \rightleftarrows HCN+NO$$

$$NCN+H \rightleftarrows HCN+N$$

$$NCN+O_2 \rightleftarrows NO+NCO$$

$$NCN+O_2 \rightleftarrows NO+CNO$$

Les hautes températures présentes durant la phase de décollage et de montée de l'aéronef contribuent fortement à la formation de NO_x. Les émissions de NO_x à proximité des aéroports sont dangereuses pour l'environnement. Ces composés sont des gaz irritants pour les voies respiratoires. Le monoxyde d'azote NO est un précurseur de l'ozone troposphérique (Figure I.7) [14]. Ce dernier a un impact néfaste sur la santé humaine, les tissus animaux et végétaux. Par un processus d'oxydation puis d'addition avec les oxydes d'azote NO_x, l'acétaldéhyde qui est un polluant toxique de l'air formera du nitrate de peroxyacétyle (PAN). C'est un polluant secondaire nuisible pour les végétaux. La photodissociation du PAN reforme le dioxyde d'azote NO_2. Cette espèce peut donc être une source de NO_x dans certains endroits où l'on n'en avait pas produit. D'autre part, le nitrate de peroxyacétyle contribue à la formation de l'ozone troposphérique.

Entre autre, la présence de NO_x dans la haute troposphère (HT) et dans la basse stratosphère (BS) est due aux émissions des moteurs d'avions. Ainsi ces polluants contribuent à la formation ou à la destruction d'ozone dans les couches de la haute atmosphère.

Les moteurs d'avions émettent aussi du monoxyde de carbone. Le CO est émis lorsque le moteur tourne au ralenti (roulage au sol). Ces émissions proviennent de la combustion incomplète du kérosène. C'est un composé toxique qui participe à la formation d'ozone troposphérique et à un effet nuisible sur la santé humaine. C'est un poison pour l'hémoglobine. Il se fixe sur l'hémoglobine du sang à la place de l'oxygène, d'où un manque d'oxygénation du système nerveux, du cœur et des vaisseaux sanguins.

La combustion incomplète du kérosène contribue aussi à la formation d'hydrocarbures imbrûlés. Ces derniers sont émis au régime de ralenti et au roulage au sol de l'appareil. Ces hydrocarbures imbrûlés appelés généralement COV (Composés Organiques Volatils) participent à la formation d'ozone troposphérique et ont un effet cancérogène. Ils participent aussi aux réactions chimiques dans la haute atmosphère. On distingue par ailleurs le méthane (CH_4) qui est un GES dont le pouvoir de réchauffement global est 25 fois supérieur au CO_2 [6].

On constate aussi les particules de suies provenant de résidus solides de gaz d'échappement. Ces polluants sont fortement émis lors des phases de décollage et de montée de l'avion. Ces particules ont un effet toxique, ils sont responsables de certaines pathologies telles que les maladies cardio-vasculaires, les allergies respiratoires et le cancer broncho-pulmonaire. Ils participent aux réactions hétérogènes contribuant à détruire l'ozone et au forçage radiatif (ils ont un impact sur la formation de cirrus [8]). Les suies sont également une source de corrosion ; elles permettent la détection radar des avions militaires.

Les émissions de dioxyde de soufre proviennent de l'oxydation du soufre présent dans le kérosène pendant la combustion. Ces émissions ont un impact sur la santé, sur l'acidification de l'atmosphère, sur la formation d'aérosols à partir de sulfates et d'acide sulfurique qui contribuent aux pluies acides.

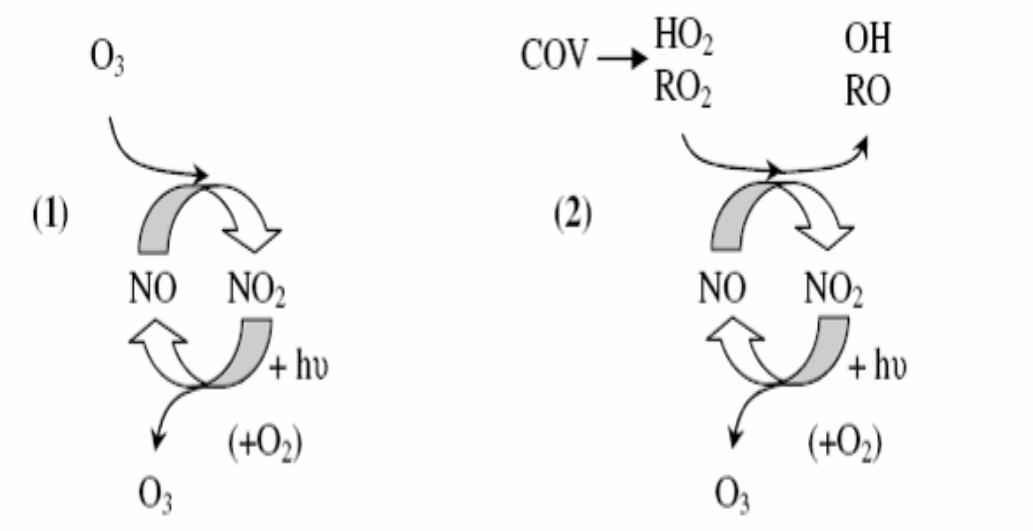


Figure I.7: Cycle de l'ozone troposphérique en milieu non pollué (1) et pollué (2) (en présence de COV, oxydes d'azote et de lumière) [14]

1.1.3.2 Les réglementations

Depuis les années 60, l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI), qui fut crée en 1944, se consacre aux problèmes liés à l'environnement. Dans le but de limiter l'impact du secteur aérien sur la pollution atmosphérique, des mesures visant à réduire les émissions de certains types d'aéronefs ont été prises en 1971 par l'Assemblée de l'OACI. En 1977, le Comité sur les émissions des moteurs d'avions (CAEE) vu le jour afin d'établir des normes sur les émissions des moteurs d'avions. Par la suite un Comité sur la protection de l'environnement en aviation (CAEP) a été crée en 1983 pour remplacer le CAEE et le CAN (Comité sur le bruit des aéronefs). Les normes établies figurent dans le Volume II – Émissions des moteurs d'aviation dans l'Annexe 16 – Protection de l'environnement à la Convention relative à l'aviation civile internationale [15]. Ces normes sont intensifiées pour chaque nouvelle génération d'avion. Elles permettent de fixer une limite d'émission de certains polluants de l'air tels que les NO_x, le CO et les hydrocarbures imbrûlés, pour un cycle d'atterrissage et de décollage (CAD). La norme LTO limite les émissions locales créées par le trafic aérien à 915 mètres d'altitude. D'autre part, ces normes tendent aussi à limiter les émissions de moteurs d'aéronef en altitude.

Le cycle LTO (Landing-Take Off) ou CAD est un cycle théorique d'atterrissage et de décollage défini par l'OACI qui va permettre une quantification des émissions de polluants issus du trafic aérien à basse altitude. La Figure I.8 illustre les émissions des principaux polluants émis par un aéronef à Roissy Charles De Gaulle lors du cycle LTO.

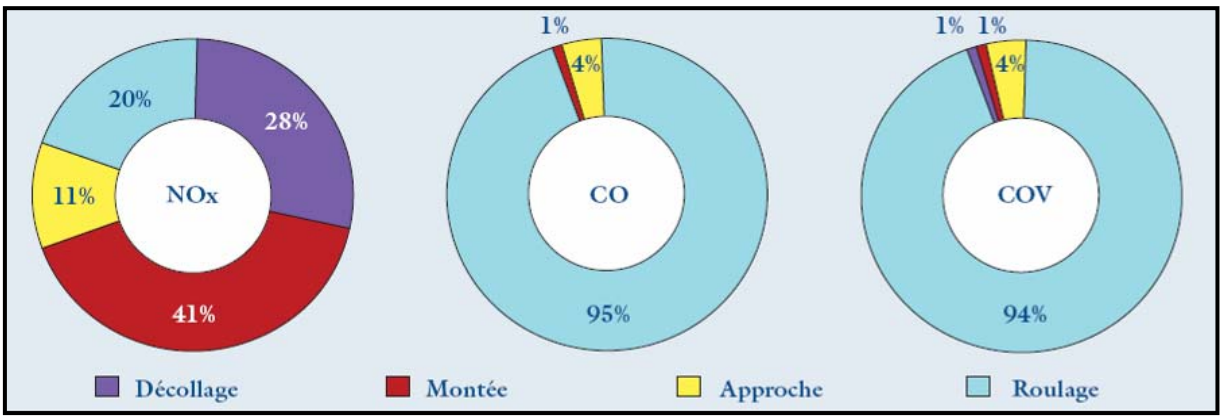


Figure I.8: Emissions des différents polluants lors d'un cycle LTO à Roissy-CDG *(source, DRIRE Île-de-France – AIRPARIF* [16]*)*

Le cycle LTO est composé de quatre phases :

- 4 minutes d'approche (descente)
- 26 minutes de circulation au sol, roulage à l'arrivée et au départ (vers et depuis l'aérogare)
- 42 secondes lors de la phase de décollage
- 3 minutes de montée

Selon le Conseil international de coordination des associations des industries aérospatiales (ICCAIA), les progrès technologiques et les réglementations de plus en plus sévères ont permis de diminuer les émissions de CO, de NO_x, de fumées et de HC imbrûlés. La quantité de soufre dans le kérosène est de plus en plus faible d'où une diminution des émissions de SO_2. D'ici 2020, les constructeurs d'avions envisagent de réduire d'avantage les émissions de composés polluants issus du secteur aérien. Le groupe européen ACARE a d'autres objectifs tels que la réduction à moitié de la consommation du kérosène et de 80% des émissions d'oxydes d'azote d'ici 2020.

1.2 Le carburéacteur : Kérosène

1.2.1 Origine et généralités

Le kérosène (Jet A-1, Jet A, TR0, JP-8) est le carburéacteur utilisé dans le secteur aéronautique. Il existe plusieurs types de carburéacteur dans le monde. Le Jet A-1 est un carburant de type kérosène utilisé dans l'aviation civile internationale. Il présente des similitudes avec le Jet A utilisé aux Etats-Unis. En France le kérosène utilisé pour l'aviation militaire est appelé TR0 (JP-8 aux Etats-Unis et AVATUR au Royaume-Uni).

Le kérosène est issu de la distillation et du raffinage du pétrole brut. Il est obtenu à des coupes intermédiaires entre celle de l'essence (en dessous de 448 K) et celle du gazole (au dessus de 548 K). Cette coupe de pétrole est constituée de nombreux hydrocarbures contenant essentiellement des alcanes de formule chimique allant de $C_{10}H_{22}$ à $C_{14}H_{30}$. Il a comme principale caractéristique de posséder un point de congélation très bas (-47 °C pour le Jet A-1, -40 °C pour le Jet A et le TR0) afin d'éviter toute congélation à haute altitude où les températures sont comprises entre -55 °C et -50 °C.

Comme nous le montre le tableau ci-dessous, la formule chimique moyenne du kérosène diffère d'une source à une autre et varie globalement de $C_{10,9}H_{20,9}$ et $C_{12}H_{23}$:

Sources	Formule chimique
Gracia-Salcedo et al. [17]	**$C_{12}H_{23}$**
Edwards et Maurice [18]	**$C_{11}H_{21}$**
Martel [19]	**$C_{11.6}H_{22}$**
Guéret [20]	**$C_{11}H_{22}$**
Nguyen et Ying [21]	**$C_{11}H_{23}$**

Tableau I.3 : Formule chimique du kérosène conventionnel

La formule chimique adoptée tout au long de mes travaux de thèse est celle proposée par Guéret [20] : $C_{11}H_{22}$

1.2.2 Composition chimique du kérosène

Le carburant kérosène est un mélange de plusieurs milliers d'hydrocarbures. On y trouve principalement des hydrocarbures de types paraffiniques ou alcanes (50-65% vol.), naphténiques ou cyclanes (20-30% vol.) et mono- et poly-aromatiques (10-20% vol.) [22].

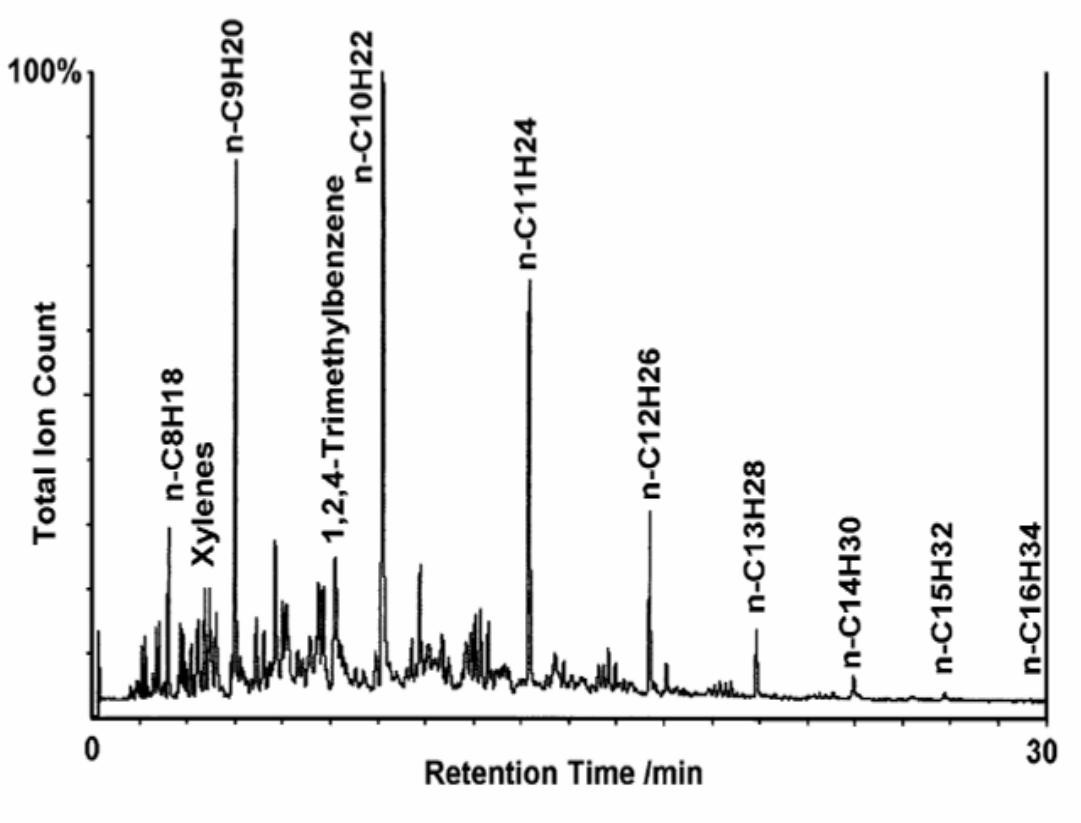


Figure I.9 : Chromatogramme d'un échantillon de kérosène de type TR0 [23].

La figure ci-dessus (Figure I.9) montre les résultats d'une analyse chromatographique en phase gazeuse couplée à un détecteur à spectrométrie de masse (CG/SM) d'un échantillon de kérosène de type TR0 destiné à l'aviation militaire. Le chromatogramme montre bien l'importance de la famille chimique des alcanes (n-C_9H_{20}, n-$C_{10}H_{22}$, n-$C_{11}H_{24}$, n-$C_{12}H_{26}$) dans le carburéacteur.

Le Tableau I-4 montre les principales caractéristiques du carburant kérosène.

Propriété	JP-8 [a]	JP-8 [b]	JP-8/Jet A-1 [c]	Jet A [b]	JP-8 [d]	Kérosène [e]
Masse molaire ($g.mol^{-1}$)		152		162		
Formule chimique	-	$C_{10.9}H_{20.9}$	$C_{11}H_{21}$	$C_{11.6}H_{22}$	-	-
Nombre d'atomes de carbone	-	10,9	11	11,6	-	9-13
H/C ratio	-	1,92	1,91	1,9	-	1,9-2,1
Point d'ébullition (°C)	140-300	Moyenne 204	165-265	Moyenne 216	-	140-280
Densité à 15°C	0,81		0,81		-	0,77-0,83
Composition volumique %						
Aromatiques	20		18		18(mono-aro.) + 2(di-aro.)	10-20
Naphtènes	20		20		20	20-30
Paraffines	58		60		28(n-par.) + 29(i-par.)	50-65
Oléfines	2		2		-	0

Tableau I.4 : Les principales caractéristiques du kérosène [24][a]

[a] D.R Sobel, L.J. Spadaccini. *Hydrocarbon fuel cooling technologies for advanced propulsion*, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 1997, vol. 119

[b] C.R Martel. *Molecular weight and average composition of JP-4, JP-5, JP-8 and Jet A*, AFWAL/POSF Report, 1988

[c] T. Edwars, L.Q. *Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels*, Journal of Propulsion and Power, vol. 17, pp. 461-466

[d] A. Violi et al, *Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixture*, Combustion Science and Technology vol. 174, pp. 399-417

[e] J.C. Guibet. Fuels and Engines, Paris: Editions Technip, 199

1.3 Les carburants reformulés

Pour lutter contre le changement climatique engendré par l'effet de serre anthropique et réduire la dépendance du secteur du transport aérien au pétrole, on se doit de trouver des solutions aux carburants conventionnels actuels. Par conséquent, ces dernières années, pour des raisons énergétiques et environnementales les activités de recherche sur la reformulation des carburants ont considérablement augmenté. En effet les biocarburants et les carburants de synthèse sont prétendus moins nocifs que les carburants fossiles dans la mesure où ils réduisent les émissions de gaz à effet de serre.

Des sociétés françaises telles que l'IFP (Institut Français du Pétrole) sont engagées dans la recherche de nouvelles énergies et plus particulièrement dans la diversification des sources de carburants. L'IFP participe au projet européen ALFA-BIRD (Alternative Fuels and Biofuels for Aircraft Development) qui vise à étudier et à développer des carburants de substitutions pour le secteur aéronautique. Ce projet a débuté en Juillet 2008. Les premiers carburants alternatifs sélectionnés pour cette étude sont les carburants de synthèses issus du charbon, de la biomasse et du gaz naturel ou des agro-carburants tels que les alcools ayant une longue chaîne carbonée et les esters issus des huiles végétales.

En septembre 2008, un groupe internationale nommé Sustainable Aviation Fuel Users Group a été créé dans le but de développer et d'accélérer l'utilisation des carburants alternatifs destinés aux aéronefs. On y trouve plusieurs compagnies aériennes telles que Air France, Air New Zeland, Japan Airlines ou encore British Airways.

1.3.1 Les carburants de synthèse - La synthèse Fischer-Tropsch

La synthèse Fischer-Tropsch (F-T) permet la fabrication d'un carburant de type kérosène ou gazole à partir de gaz de synthèse, aussi appelé syngas (constitué d'un mélange de CO et H_2). C'est en 1920 que deux chimistes allemands, Hans Fischer et Franz Tropsch réussissent pour la première fois à produire un gaz de synthèse à partir d'un combustible fossile (le charbon). L'hydrogène et le monoxyde de carbone produits vont réagir pour former des radicaux alkyles et de l'eau selon la réaction suivante :

$$2H_2 + CO \rightleftharpoons -CH_2- + H_2O \qquad \Delta H298°K = -165\ kJ.mole^{-1}$$

Les radicaux alkyles formés vont par la suite réagir avec un catalyseur à base de fer ou à base de cobalt pour produire respectivement des oléfines (utilisées pour produire des détergents synthétiques) ou des paraffines saturées allant de C_2H_6 au $C_{80}H_{162}$. Les chaînes d'hydrocarbures de type paraffinique supérieures à C_{20} obtenues sous la forme de cires solides sont transformées en carburant de synthèse via des procédés d'hydro-isomérisation et d'hydrocraquage.

$$n\ (2H_2 + CO) \rightleftharpoons C_nH_{2n} + nH_2O \text{ (catalyseur à base de fer)}$$

$$(2n+1)\ H_2 + nCO \rightleftharpoons C_nH_{2n+2} + nH_2O \text{ (catalyseur à base de cobalt)}$$

Le combustible liquide produit (du kérosène ou du gazole) ne contient pratiquement pas de métaux, d'azote, de soufre, ni d'aromatiques [25, 26]. Le kérosène synthétique (SPK) formé a un rapport hydrogène-carbone (H/C ratio) plus élevé que le carburéacteur standard Jet A-1 (1,91 pour le Jet A-1 contre 2,12 pour le SPK). La composition du kérosène de synthèse entraîne une réduction des émissions de CO_2 [8] et une hausse des émissions de vapeur d'eau. Il en résulte une diminution des GES dans les basses altitudes (H_2O ne présente pas de danger à basse altitude [27]). Dans les hautes altitudes les effets sont plus complexes et difficiles à déterminer. La réduction de la teneur en hydrocarbures aromatiques et en hydrocarbures insaturés dans le kérosène synthétique entraîne une réduction des rejets de particules de suies et d'hydrocarbures imbrûlés [28, 29]. Le carburant de synthèse ainsi formé est de meilleure qualité (pas d'aromatique, d'azote ni de soufre) que les carburants classiques, d'où une réduction des émissions polluantes. Ces carburants de synthèse représentent une bonne alternative aux carburants conventionnels actuels.

On recense trois principaux carburants de synthèse formés à partir de la synthèse F-T. Le carburant obtenu à partir du charbon (charbon vers les liquides, CTL), à partir du gaz naturel (gaz vers les liquides, GTL) et à partir de la biomasse (biomasse vers les liquides, BTL).

Pour faire face à la demande croissante de carburant à l'aéroport international de Johannesburg et pour augmenter sa production, la société Sasol a obtenu en 1999

l'approbation d'un carburéacteur semi-synthétique pour l'aviation civile. Ce carburant de synthèse est produit à partir du charbon par des procédés F-T. Il est constitué en grande partie d'iso-paraffines [30, 31]. Toutefois la société Sud-Africaine a proposé la fabrication d'un kérosène entièrement synthétique contenant des aromatiques pour pouvoir répondre aux exigences internationales des propriétés d'un carburéacteur classique.

Le mode de production d'un kérosène synthétique par un procédé F-T à partir du charbon utilisé par la société Sud-Africaine Sasol est illustré sur la Figure I.10.

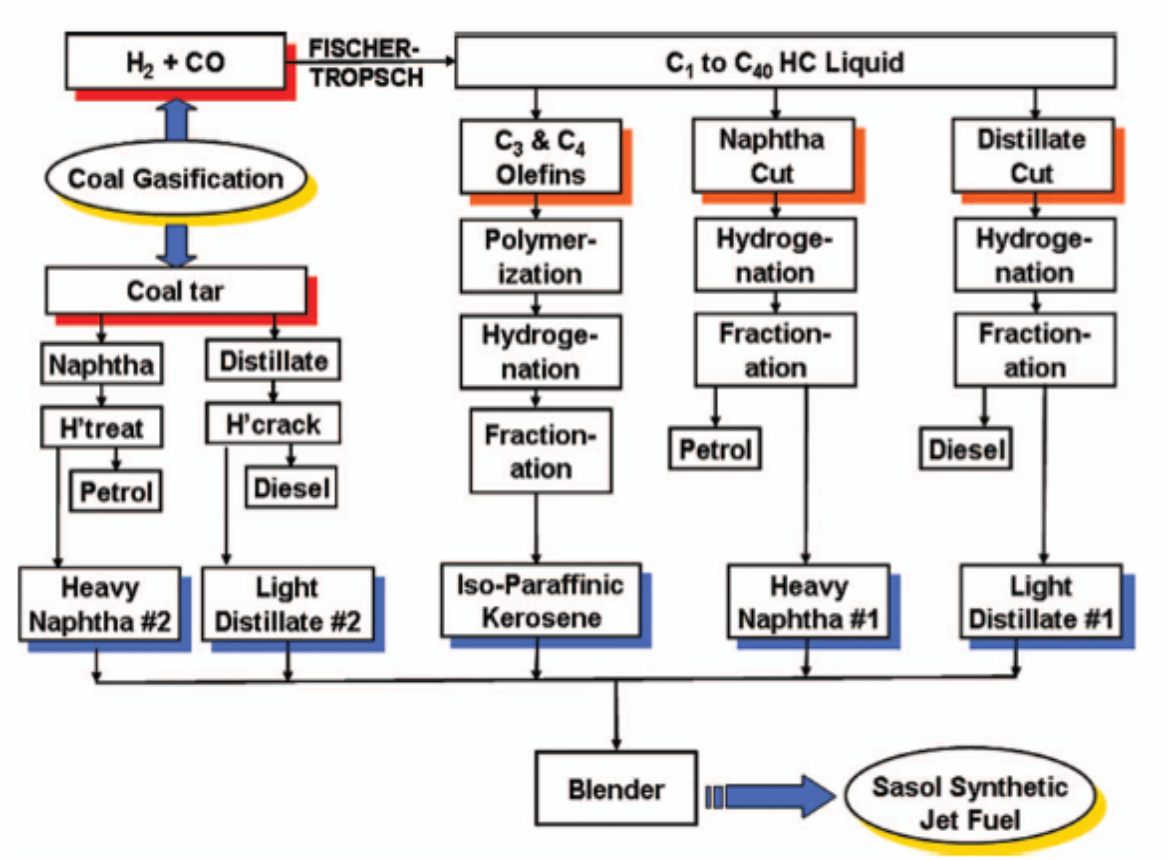


Figure I.10 : Mode de production d'un kérosène synthétique par Sasol (Sasol Synthetic Jet Fuel) [30]

D'autres sociétés de raffinage telles que Shell, Exxon-Mobil ou encore Syntroleum ont déjà développé ou sont en voie de développer des usines de production de carburants synthétiques par des procédés F-T à partir du gaz naturel ou de la biomasse.
Dans le cas du secteur aérien, on a pu assister en 2008 à un essai avec un Airbus alimenté par un kérosène de synthèse GTL fabriqué par la société Shell

1.3.2 Composition chimique

Les carburéacteurs de synthèse sont composés de plusieurs centaines d'hydrocarbures. Leur composition varie selon les procédés de fabrication. En effet comme l'illustre la figure ci-dessous, les carburéacteurs de synthèse sont principalement composés de n-paraffines, d'iso-paraffines et de cycloparaffines. Ils contiennent de fortes proportions en iso-paraffines (65-74% mole) [32]. Ces iso-paraffines ont comme particularité d'être peu ramifiées (une à deux ramifications, -CH_3-) [33, 34].

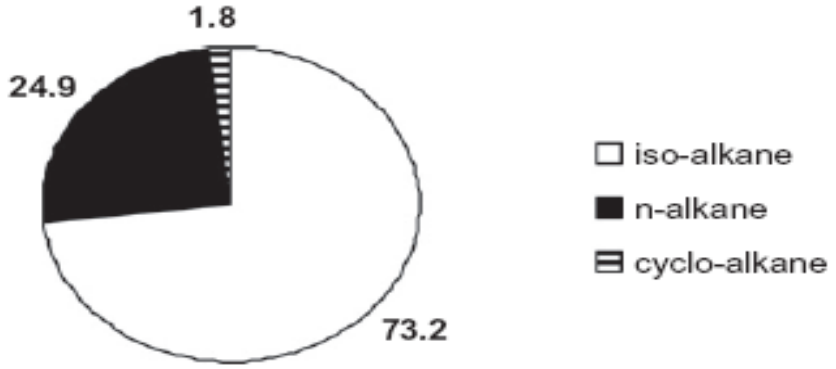


Figure I.11 : Composition d'un kérosène synthétique F-T issu du gaz naturel produit par Syntroleum (% molaire) [32]

Leurs propriétés doivent se rapprocher de celles des carburéacteurs conventionnels: indice de cétane, point d'ébullition, pouvoir calorifique, densité et rapport H/C, pour empêcher des effets néfastes sur les performances du moteur [35].

Propriétés	Jet A-1 [35, 36]	F-T [32]	GTL Shell [32]
Chaleur spécifique ($MJ.kg^{-1}$)	43.0	44,1	44,2
Indice de Cétane	-	60	61
Point d'ébullition (K)	166-266	474	445
Densité ($g.cm^{-3}$)	0,8	0,755	0,736
H/C ratio	1,91	2,17	2,17

Tableau I.5: Les propriétés d'un kérosène conventionnel et de synthèse

1.3.3 Les biocarburants ou agro carburants

Les biocarburants sont produits à partir de matières premières (grasses) animales ou végétales (biomasse). Ces combustibles d'origine végétale sont renouvelables et non fossiles. On recense les biocarburants issus de plantes amylacées ou sucrières, les biocarburants issus des graines de plantes oléagineuses et les biocarburants issus des micro-algues.

Les alcools sont issus de plantes riches en sucres (canne à sucre, betterave) ou en amidon (blé, maïs). Ils sont produits par un processus de fermentation de la biomasse. Ce processus permet par exemple la production de l'éthanol. Il peut fonctionner comme biocarburant pur dans le cas de moteur spécialement adapté ou comme additif.

Les huiles issues des plantes oléagineuses (tournesol, colza, soja, palme) sont constituées de triglycérides qui sont des esters de glycérol et d'acide carboxyliques gras. Ces huiles végétales possèdent une viscosité élevée et présentent des difficultés à s'auto-enflammer dans un moteur Diesel. Elles seront trans-estérifiées au méthanol ou à l'éthanol dans le but de former des esters méthyliques d'huile végétale EMHV ou des esters éthyliques d'huile végétale EEHV dont les caractéristiques physico-chimiques sont plus proches du gazole. L'hydrotraitement direct de ces huiles végétales est une technique qui va permettre d'obtenir des coupes de gazoles et de kérosènes de haute qualité.

On inventorie également les biocarburants de troisième génération (la filière micro-algues). Cependant il reste de nombreux progrès à faire dans ce domaine.

Les biocarburants ont un avantage majeur sur les carburants fossiles dans la mesure où ils permettent de limiter les émissions de GES [8, 25]. Ils ont un bilan carbone « du puits à la roue » inférieur à celui des carburants fossiles classiques. Néanmoins, ils ne règlent pas le problème des émissions polluantes. D'autre part, la concurrence de ces agro-carburants avec la production alimentaire pose problème. Cela peut être un facteur de hausse des prix des produits agricoles initialement destinés à l'alimentation. C'est ainsi que s'est développée la production des biocarburants dits de deuxième génération (jatropha, camelina etc.).

On a pu assister en décembre 2008 au premier vol d'un Boeing 747-400 Air New Zealand entre Auckland et Wellington. Un des quatre réacteurs de Rolls Royce a été alimenté par un mélange 50%/50% de dérivé d'huile de Jatropha curcas (biocarburant de seconde génération) et d'un kérosène commerciale Jet A-1.

Le combustible à base de jatropha a un pouvoir énergétique proche de celui du kérosène classique Jet A-1. En effet ce dernier a un pouvoir calorifique de 43,2 $MJ.kg^{-1}$ contre 44,3 $MJ.kg^{-1}$ pour le biocarburant [8].

Un autre essai a été réalisé par la compagnie aérienne Continental Airlines le 7 janvier 2009. L'un des deux moteurs du Boeing 737-800 a été alimenté avec 50% de kérosène conventionnel et 50% de biocarburant à base de jatropha (47,5%) et d'algues (2,5%).

Le 30 janvier 2009, la compagnie aérienne japonaise Japan Airlines effectuait avec succès un essai avec un Boeing 747-300 équipé de moteurs Pratt & Whitney JT9D. Un des moteurs a été alimenté par un mélange 50%/50% de kérosène commercial/biomasse (camelina 42%, jatropha 8% et algues <0,5%) [8].

Le tableau AIII-1 (Annexe III) présente un résumé non exhaustif des récentes démonstrations effectuées avec du carburant alternatif.

1.4 Objectifs

Dans ce contexte, des études cinétiques d'oxydation d'un kérosène conventionnel Jet A-1, d'hydrocarbures purs à longue chaîne carbonée (n-undécane, n-dodécane et n-tétradécane), d'un kérosène de synthèse SPK (IFP) pur et des mélanges kérosène/hexan-1-ol (90/10 m/m), kérosène/Rapeseed Methyl Ester (90/10 m/m) et kérosène/GTL (50/50 m/m) ont été menées en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) à Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement sur le campus du CNRS d'Orléans.

D'autres études sur des carburants alternatifs ont été menées en JSR dans le cadre du projet européen ALFA-BIRD :

- CTL (Sasol), GTL (Shell) et GTL/hexan-1-ol (80/20,v/v)

L'objectif de ce travail est la compréhension du déroulement de la combustion des carburants reformulés destinés au secteur aérien.

1.5 Conclusion

L'aviation est un moyen de transport rapide et très énergivore. Aujourd'hui le transport aérien est devenu une source majeure de pollution [37]. Les menaces sur les ressources pétrolières et les contraintes environnementales telles que le réchauffement de la planète et la pollution atmosphérique liées à l'utilisation de carburants fossiles poussent le secteur des transports à économiser le pétrole et à réduire ses émissions de gaz à effet de serre et de polluants de l'air.

Au cours de ces dernières années l'essor du trafic aérien a contribué au développement de carburants alternatifs pouvant être adapté au transport aérien. De ce fait, les carburants reformulés tels que les biocarburants et les carburants de synthèse font l'objet d'importantes recherches (impact sur les émissions polluantes, etc.…) et de développements.

Références bibliographiques

[1] Union Française des Industrie Pétrolière (UIFP), http://www.ufip.fr

[2] International Air Transport Association (IATA), http://www.iata.org

[3] U.S. Energy Information Administration, 2010

[4] D. Krajka

Le kérosène secoué, http://www.indices.usinenouvelle.com/

[5] Chevron Global Aviation,

Aviation Fuels Technical Review, 2006

[6] Intergovernmental Panel on Climate Change, 2007, http://www.ipcc.ch

[7] Simon Vinot et Paula Coussy

Les émissions de gaz à effets de serre des transports, Panorama, 2009, http://www.ifp.fr

[8] L. Rye, S. Blakey and C. W. Wilson

Sustainability of supply or the planet: a review of potential drop-in alternative aviation fuels, Energy & Environmental Science, 2010, vol. 3, pp. 17-27

[9] J. Rosenfeld, J. Remes, L. Mendonca, W. Hu, S. Palani, U. Sethi, S. Nyquist, I. Bozon, O. Roelofsen, P. Haas, K. Vermeltfoort and G. Terzian

Averting the next energy crisis: The demand challenge, McKinsey Global Institue, 2009

[10] Jean-Marc Barnola, Laboratoire de Glaciologie et Géophysique de l'Environnement, Grenoble

[11] Paul Kuentzman

Les défis du transport aérien, ONERA, conférence UPMC 23 novembre 2010

[12] J. Zeldovich

The oxidation of nitrogen in combustion and explosions, Acta Physicochimica URSS, 1946, vol. 21, pp. 577-628

[13] C. P. Fennimore

Formation of nitric oxide in premixed hydrocarbons flames, Proceedings of the Combustion Institue, 1971, vol. 13, pp. 373-380

[14] K. Miet

Etude expérimentale de la dégradation hétérogène des Composés Aromatiques Polycycliques (CAP) d'intérêt troposphérique, Thèse, Université de Bordeaux, 2008

[15] La convention relative à l'aviation internationale, Ogranisation de l'Aviation Civile Internationale OACI

Protection de l'environnement, Annexe 16

[16] *La qualité de l'air autour des plates-formes aéroportuaires de ROISSY-CHARLES DE GAULLE ET DU BOURGET,* AIRPARIF Acualité, n° 21, février 2004, www.airparif.asso.fr

[17] M. Gracia-Salcedo, J. McBride, A. Brabbs

Experimental verification of the thermodynamic properties of Jet A Fuel, NASA Technical Memorandum 101475, 1988

[18] T. Edwards and L. Q. Maurice

Surrogate Mixtures to Represent Complex Aviation and Rocket Fuels, Journal of Propulsion and Power, 2001, vol. 17, pp. 461-466

[19] C. R. Martel

Molecular weight and average composition of JP-4, JP-5, JP-8 and Jet A, AFWAL/POSF Report, July 15, 1988

[20] C. Guéret

Elaboration d'un modèle cinétique pour l'oxydation du kérosène et d'hydrocarbures représentatifs, Thèse, Université d'Orléans, 1989

[21] Nguyen and Ying

Critical evaluation of Jet A spray combustion using propane chemical kinetics in gas turbine combustion simulated by KIVA-II, 26th Joint Propulsion conference, July 16-18 1990, Paper AIAA-90-2439, Orlando, FL

[22] P. Dagaut, A. El Bakali, A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[23] P. Dagaut

On the kinetic of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp. 2079-2094

[24] P. Dagaut and M. Cathonnet

The ignition, oxidation and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modelling, Energy and Combustion, 2006, vol. 32, pp. 48-92

[25] K. Kohse-Hoinghaus, P. Osswald, T. A. Cool, T. Kasper, N. Hansen, F. Qi, C. K.Westbrook and P. R. Westmoreland

Biofuel Combustion Chemistry: From Ethanol to Biodiesel, Angewandte Chemie International Edition, May 2010, vol. 49, pp. 3572-3597

[26] D. Ballerini et N. Alazard-Toux

Les biocarburants : État des lieux, perspectives et enjeux du développement, Editions TECHIP, 2006

[27] M. Nehse, J. Warnatz and C. Chevalier

Kinetic Modeling of the Oxidation of Large Aliphatic Hydrocarbons, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, vol.26, pp. 773-780

[28] E. Corporan, M. J. Dewitt, V. Belovich, R. Pawlik, A. C. Lynch, J. R. Gord and T. R. Meyer

Emission Characteristics of a Turbine Engine and Research Combustor Burning a Fischer-Tropsch Jet Fuel, Energy and Fuels, 2007, vol. 21, pp. 2615-2626

[29] M. S. P. Kahandalawa, M. J. Dewitt, E. Corporan and S. S. Sidhu

Ignition and Emission Characteristics of Surrogate and Practical Jet Fuels, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3673-3679

[30] C. A. Moses and P. N. J. Roets

Properties, Characteristics, and Combustion Performance of Sasol Fully Synthetic Jet Fuel, Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, July 2009, vol. 131

[31] C. A. Moses and L. L. Stavinoha

Qualification of Sasol Semi-Synthetic Jet A-1 As Commercial Jet Fuel, Southwest Research Institute, 1997, Report No. 8531

[32] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng and T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[33] B.L. Smith and T.J. Bruno

Improvements in the Measurement of Distillation Curves. 4. Application to the Aviation Turbine Fuel Jet A, Industrial and Engineering Chemistry Research, 2007, vol. 46, pp. 310-320

[34] S.M. Sarathy , C. Yeung, C.K. Westbrook, W.J. Pitz, M. Mehl and M.J. Thomson

An experimental and kinetic modeling study of n-octane and 2-methylheptane in an opposed-flow diffusion flame, Combustion and Flame, 2010, vol. , pp. 1277-1287

[35] T. A. Snijders and J. A. Melkert

Using Synthetic Kerosene in Civil Jet Aircraft, SAE International, 2008, Paper 2008-01-2247

[36] T. Edwards

Kerosene Fuels for Aerospace Propulsion-Composition and Properties, 38th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, 7-10 July 2002, Paper 2002-3874, Indianapolis, Indiana

[37] L. Chapman

Transport and climate change: a review, Journal of Transport Geography, 2007, vol. 15 pp. 354-367

CHAPITRE 2

ÉTUDE BIBLIOGRAPHIQUE

2 Étude bibliographique 43

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 43

2.1.1 Domaine de basse température 44

2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT) 46

2.1.3 Domaine de haute température 48

2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation du kérosène 49

2.2.1 Études expérimentales 49

2.2.2 Mécanismes cinétiques 55

2.3 État de l'art sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions 57

2.3.1 Oxydation du n-décane 58

2.3.2 Oxydation du n-undécane 64

2.3.3 Oxydation du n-dodécane 64

2.3.4 Oxydation du n-tétradécane 68

2.3.5 Mécanismes cinétiques pour l'oxydation d'alcanes lourds 68

2.4 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés 72

2.4.1 Études expérimentales 72

2.4.2 Mécanismes cinétiques 77

2.5 Conclusion 80

Références bibliographiques 81

2 Étude bibliographique

Dans ce chapitre nous présenterons l'état de l'art sur l'oxydation des hydrocarbures. Nous exposerons par la suite les différents travaux publiés sur l'oxydation du kérosène, des hydrocarbures lourds (n-décane, n-undécane, n-dodécane et n-tetradécane) et des carburants reformulés utilisés dans le secteur aéronautique

2.1 Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures

On expose ici les principales caractéristiques de l'oxydation des hydrocarbures de type paraffinique aussi appelés alcanes. Comme nous l'avons vu précédemment (voir Chapitre II-Contexte), les composés paraffiniques sont les constituants majoritaires présents dans le kérosène. Ils se regroupent en deux groupes : les linéaires ou n-paraffines et les ramifiées ou iso-paraffines.

Le mécanisme d'oxydation des alcanes diffère selon la température du milieu réactionnel. On observe en effet différents modes d'oxydation.

À basse température le mécanisme d'oxydation s'opère selon le processus de peroxydation-isomérisation. Par contre, à plus haute température ce sont les réactions de rupture de liaisons qui prédominent dans le milieu [1]. Une zone intermédiaire est observée entre les domaines de basses et hautes températures. Cette zone correspond au « coefficient négatif de température » (CNT). Il existe donc trois régimes d'oxydation qui sont représentés sur la figure ci-dessous (Figure II.1).

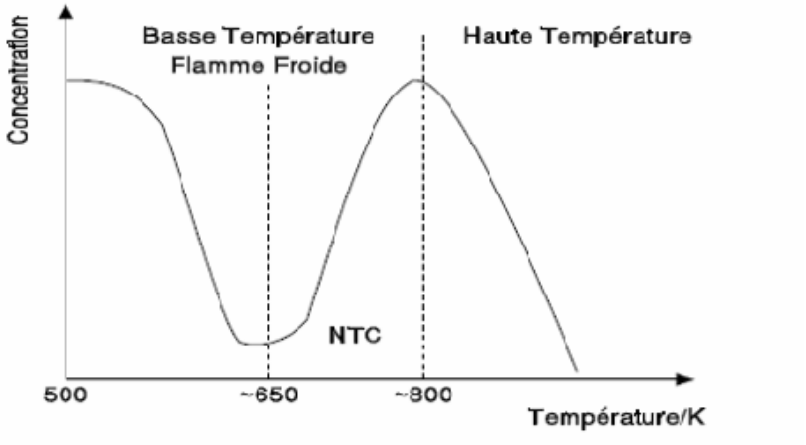


Figure II.1: Evolution des mécanismes d'oxydations avec la température

2.1.1 Domaine de basse température

Ce domaine de basse température (550-800 K) est caractérisé par une lente réactivité. Le mécanisme d'oxydation se déroule initialement par une réaction d'oxydation entre les molécules d'oxygène présentes dans le milieu réactionnel et le réactif hydrocarboné, RH. Cette réaction entraîne la formation de radicaux alkyles par arrachage d'un atome d'hydrogène sur le réactif initial RH (1). Mais cette réaction devient vite négligeable devant les réactions de métathèse entre le réactif RH et des petits radicaux X (X = OH, H, HO_2, O) (2). Par la suite une étape de péroxydation va avoir lieu avec les radicaux alkyles pour former des radicaux peroxyalkyles RO_2 (3).

$$RH + O_2 \rightleftharpoons R + HO_2 \qquad (1)$$

$$RH + X \rightleftharpoons R + HX \qquad (2)$$

$$R + O_2 \rightleftharpoons RO_2 \qquad (3)$$

Les radicaux RO_2 formés vont réagir via différentes voies pour former des radicaux alkoxy RO selon la réaction (4), une molécule hydroperoxyalkyle RO_2H selon la réaction (5) et un radical hydroperoxyalkyle QO_2H suivant la réaction (6).

- Les radicaux alkoxy sont formés via une réaction de dismutation entre les radicaux RO_2 et $R'O_2$ selon la réaction suivante :

$$RO_2 + R'O_2 \rightleftharpoons RO + R'O + O_2 \qquad (4)$$

- La molécule hydroperoxyalkyle, RO_2H, est formée par arrachage d'un atome d'hydrogène sur une molécule hydrocarbonée, R'H, par réaction avec le radical peroxyalkyle suivant la réaction (5). La molécule formée va par la suite se décomposer en radicaux alkoxy, RO, et hydroxyle, OH.

$$RO_2 + R'H \rightleftharpoons R' + RO_2H \qquad (5)$$

$$RO_2H \rightleftharpoons RO + OH \qquad (6)$$

- Le radical peroxyalkyle, RO_2, va réagir par isomérisation (7) via un état de transition cyclique pour former un radical hydroperoxyalkyle QO_2H.

$$RO_2 \rightleftharpoons QO_2H \qquad (7)$$

Le nouveau radical hydroperoxyalkyle formé va aussi réagir selon plusieurs voies. Il peut se décomposer en espèces moléculaires et en nouveaux radicaux. On aura soit une formation d'un radical hydroperoxyle, HO_2, et d'une oléfine soit un radical hydroxyle, OH, et différents produits tels que des éthers cycliques et des composés carbonylés (8).

Le radical QO_2H peut aussi s'additionner à une molécule d'oxygène formant un radical peroxy-hydroperoxyalkyle O_2QO_2H (9). Ce dernier peut s'isomériser et se dégrader en libérant deux radicaux OH (10). Ce processus de ramification est responsable de l'apparition de la flamme froide.

$$QO_2H \rightleftharpoons \text{produits} + OH \qquad (8)$$

$$QO_2H + O_2 \rightleftharpoons O_2QO_2H \qquad (9)$$

$$O_2QO_2H \rightleftharpoons HO_2Q'O_2H \qquad (10)$$

$$HO_2QO_2H \rightleftharpoons 2OH + OQ'O \qquad (10)$$

Le mécanisme d'oxydation de basse température est présenté sur la figure suivante.

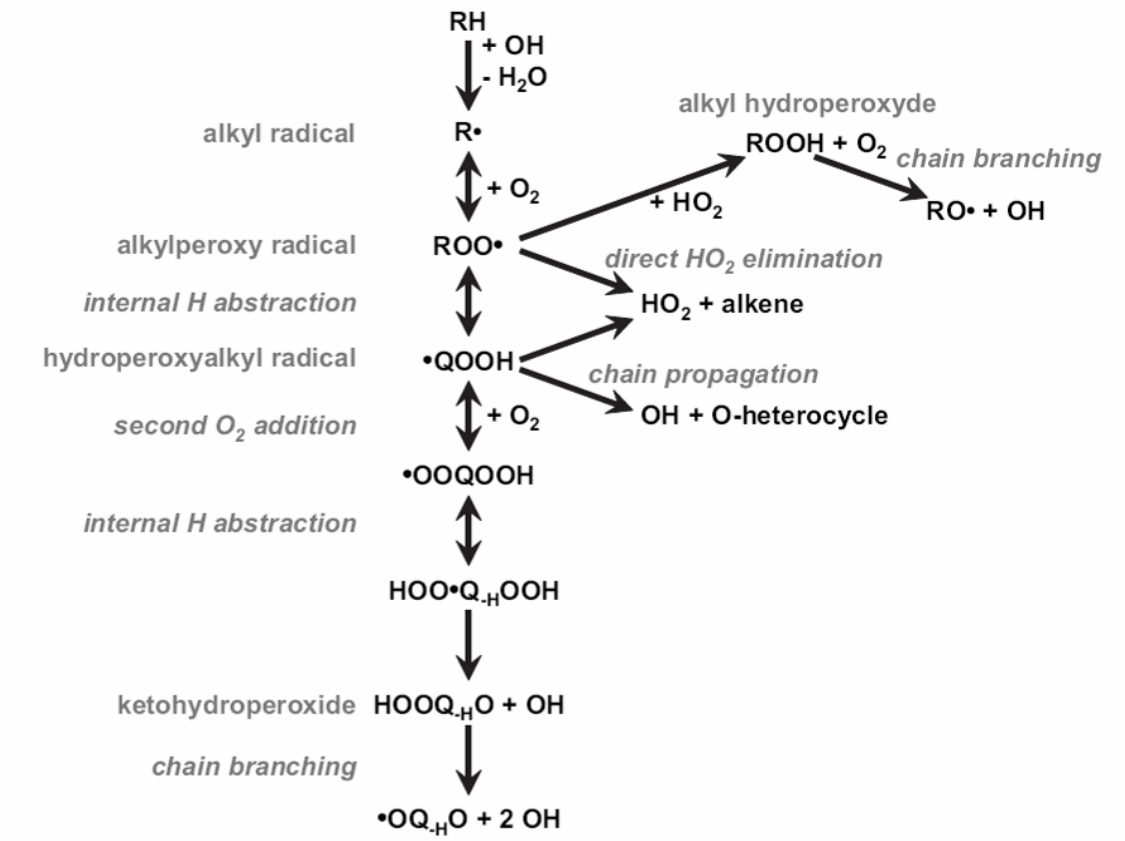


Figure II.2 : Schéma sur le principe du mécanisme d'oxydation des hydrocarbures à basse température [2]

Le domaine de basse température est caractérisé par l'apparition d'une « flamme froide » correspondant à une augmentation de la réactivité de l'hydrocarbure RH entre 550 et 650 K. Cette augmentation est initiée par les radicaux hydroxyles, OH, formés précédemment qui accélèrent la réactivité globale. Cependant, on observe une diminution de la réactivité entre 650 et 800 K. Cette zone de transition basse température/haute température correspond au coefficient négatif de température (CNT).

2.1.2 Coefficient négatif de température (CNT)

La zone CNT est une région intermédiaire entre le domaine de basse et haute température. Elle est caractérisée par une baisse de la réactivité globale du système lorsque la température augmente. La diminution de la formation des radicaux OH remplacés par

l'augmentation des radicaux HO_2 dans le système entraîne la chute de la réactivité. En effet les radicaux hydroperoxyles sont beaucoup moins réactifs que les radicaux hydroxyles.

L'augmentation de la température va entraîner un déplacement successif de l'équilibre vers les réactifs des réactions 10, 9, 7 puis 3.

$$O_2QO_2H \rightleftharpoons HO_2Q'O_2H \qquad (10)$$

$$QO_2H + O_2 \rightleftharpoons O_2QO_2H \qquad (9)$$

$$RO_2 \rightleftharpoons QO_2H \qquad (7)$$

$$R + O_2 \rightleftharpoons RO_2 \qquad (3)$$

Le déplacement vers la gauche de ces réactions entraîne donc une baisse de la production des radicaux OH (responsable de l'accélération de l'oxydation) et une augmentation de la formation des radicaux alkyles, R. Ces derniers seront responsables de la formation des radicaux HO_2 via un arrachement d'un atome d'hydrogène par une molécule d'oxygène (11).

$$R + O_2 \rightarrow \text{oléfine} + HO_2 \qquad (11)$$

Les radicaux hydroperoxyles formés vont à leur tour subir une dismutation pour donner du peroxyde d'hydrogène H_2O_2 très peu réactif dans la zone CNT.

$$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2 \qquad (12)$$

Au final la formation de deux radicaux OH et d'un autre radical sera remplacé par un seul radical OH ($QO_2H \rightarrow$éthers cycliques+OH) ou un radical HO_2 peu réactif. Il en découle une chute de la réactivité du système.

2.1.3 Domaine de haute température

Pour des températures supérieures à 800 K, les réactions en chaînes ramifiées reprennent le dessus sur les réactions en chaînes droites. Le mécanisme de haute température va être initié par la décomposition du peroxyde d'hydrogène en radicaux hydroxyles, très réactifs, suivant la réaction (13).

$$H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M \qquad (13)$$

Dans ce domaine de haute température les radicaux alkyles qui sont formés suivant la réaction RH + M → R' + R'' + M vont se décomposer en alcènes et en petits radicaux tels que H et CH_3 par rupture de liaisons (β – scission). Les radicaux méthyles peu réactifs sont consommés par des réactions de terminaison CH_3 + R → produits de terminaison.

Les radicaux H formés vont réagir avec des molécules d'oxygène pour produire des radicaux OH et O selon la réaction H + O_2 → O + OH. Cette réaction est la plus importante réaction de ramification dans la zone de haute température. Elle est responsable de l'emballement du système. Les alcènes vont conduire à la formation du monoxyde de carbone CO par un mécanisme de dégradation et/ou oxydation. Ce dernier va réagir avec le radical hydroxyle selon une réaction d'oxydation pour former le dioxyde de carbone CO_2.

En résumé le système va subir une nouvelle augmentation de la réactivité avec une vitesse d'oxydation beaucoup plus rapide que dans la zone de basse température. Ce domaine est donc caractérisé par une forte réactivité.

Le mécanisme d'oxydation de haute température peut être simplifié de la manière suivante :

$$RH + M \rightarrow R + H + M$$

$$RH + M \rightarrow R' + R'' + M$$

$$R + M \rightarrow \text{Alcènes} + R' + M$$

$$R' + M \rightarrow \text{Alcènes} + H + M$$

$$H + O_2 \rightarrow O + OH$$

$$H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$$

$$R + O_2 \rightarrow \text{oléfines} + HO_2$$

$$HO_2 + RH \rightarrow H_2O_2 + R$$

$$H_2O_2 + M \rightarrow 2OH + M$$

$$RH + X \rightarrow R + HX \ (X=H, OH, O, HO_2, CH_3, HCO, \text{radicaux hydrocarbonés})$$

$$CH_3 + R \rightarrow \text{produits de terminaison}$$

2.2 État de l'art sur la cinétique d'oxydation du kérosène

2.2.1 Études expérimentales

Les toutes premières études sur l'oxydation du kérosène portaient sur l'auto-inflammation par Mullins [3] et les limites d'inflammabilité (Mestre et Ducourneau [4]). En 1982 Spadaccini et Telvelde [5] ont effectué des travaux sur les énergies d'activation de différents carburants (Jet A, JP-4 et diesel).

Un peu plus tard, des études comparatives faites par Freeman et Lefebvre [6] entre le kérosène de type Jet A et certains hydrocarbures paraffiniques ont montré une similitude des énergies d'activation apparentes (190 $kJ.mole^{-1}$ pour le Jet A et 175 $kJ.mole^{-1}$ pour le propane).

En 1989 Guéret [7] a pu déterminer la composition du kérosène en chromatographie en phase gazeuse. Cette étude montre que le kérosène est constitué principalement de composés paraffiniques (78%), naphténiques (9,8%) et d'aromatiques (12,2%) en fraction massique. Les résultats montrent que les alcanes (paraffines) représentent la fraction d'hydrocarbure majoritaire dans le kérosène. Dans ses travaux Guéret [7, 8] a adopté la formule $C_{11}H_{22}$ pour représenter le kérosène. La similitude avec le n-décane de formule chimique $C_{10}H_{22}$ a entraîné plusieurs études comparatives.

Ainsi Dagaut *et al* [9-13] ont étudié l'oxydation du n-décane et du kérosène Jet A-1 en réacteur auto agité par jets gazeux dans les mêmes conditions expérimentales. Les résultats montrent des profils de concentration identiques pour les principaux produits d'oxydation et des cinétiques d'oxydation similaires. Néanmoins la formation du benzène issue de l'oxydation du kérosène était beaucoup plus importante que celle observée pendant l'oxydation du n-décane. Cela s'explique par la présence de composés aromatiques dans le kérosène [7].

Cathonnet *et al* [14] ont réalisé une étude de la combustion du kérosène (Jet A-1) en réacteur auto-agité. Les expériences ont été effectuées entre 550 et 1200 K, à des pressions comprises entre 10 et 40 atm et à différentes richesses (Φ = 0,5-1,5). Ils ont mesuré les profils de concentrations des espèces en fonction de la température tout en maintenant un temps de passage constant. Les travaux ont été effectués à différents temps de passage (0,5 à 2 s). Ils observent différents régimes d'oxydation. A basse température, pour des températures inférieures à 750 K, ils détectent la formation d'espèces oxygénées (CO, CO_2). Ce domaine de basse température est caractérisé par l'apparition d'une flamme froide et d'une zone de coefficient négatif de température comme lors des oxydations du n-décane. Par la suite l'oxydation s'accélère lorsque la température est supérieure à 750 K (domaine de haute température). Le formaldéhyde devient l'intermédiaire oxygénée majoritaire après le monoxyde de carbone. D'autres produits principaux tels que l'hydrogène, l'acétylène et des composés mono-aromatiques (allant de C_6 à C_9) ont été identifiés.

En 2008 Vasu *et al* [15] ont mené une étude sur l'oxydation du kérosène (Jet A et JP-8) dans un tube à choc chauffé à haute pression. Ils ont déterminé les délais d'auto-inflammation entre 715 et 1229 K, dans un large domaine de pression 17-51 atm en milieu pauvre (Φ = 0,5) et à la stœchiométrie (Φ = 1). Les délais ont été déterminés par la mesure de l'émission des radicaux OH (à 306 nm) et en mesurant la pression. Ils observent une auto-inflammation dans la région de coefficient négatif de température. Les délais diminuent avec l'augmentation de la température. Les résultats de la comparaison des deux carburants à Φ = 1 ont montré un bon accord des délais d'auto-inflammation à basse et haute température. A 1000 K le JP-8 a un délai d'auto-inflammation inférieur (~10%) à celui du Jet A.

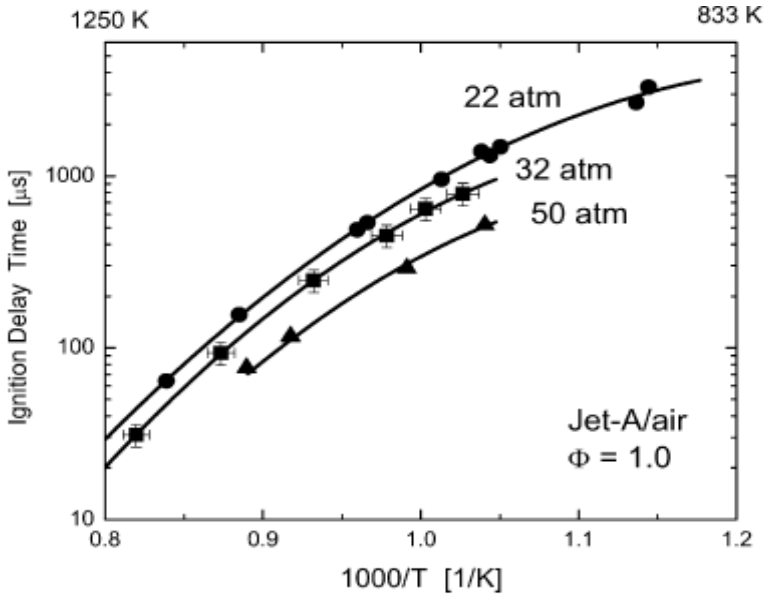


Figure II.3 : Variation des délais d'auto-inflammation avec la pression (Jet A/air, Φ = 1) [15*]*

En 2009 Vasu *et al* [16] ont comparé les délais d'auto-inflammation obtenus avec le kérosène Jet A [15] et du n-dodécane dans les mêmes conditions expérimentales. La figure ci-dessous illustre les résultats de cette étude. Ces travaux ont révélé une similitude entre les délais d'auto-inflammation des deux carburants.

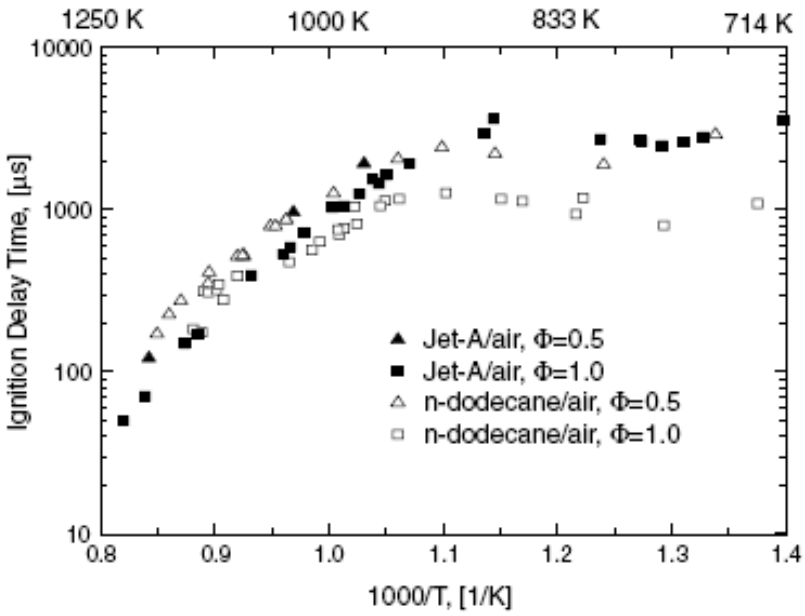


Figure II.4: Comparaison des délais d'auto-inflammation des mélanges Jet A/air et n-dodécane/air [16]

Dean *et al* [17] ont eux aussi mesuré les délais d'auto-inflammation des mélanges Jet A/air en tube à choc. Les expériences ont été effectuées entre 1000 et 1700K, à 8 atm et à différentes richesses (Φ = 0,5, 1 et 2).

L'auto-inflammation des mélanges carburéacteur/air a aussi été étudiée par Gokulakrishnan *et al* [18]. Ils ont mesuré les délais d'auto-inflammation d'un kérosène en réacteur à écoulement à pression atmosphérique et dans un large domaine de richesse (en milieu pauvre, à la stoechiométrie et en milieu riche).

Douté *et al* [19], Vovelle *et al* [20] ont mené des travaux expérimentaux sur l'oxydation du kérosène à l'aide d'un brûleur. Ces études de flammes ont confirmé que les hydrocarbures aromatiques étaient les principaux précurseurs du benzène et sont conformes aux résultats des expériences de Dagaut *et al* [10]. En effet ils ont obtenu une réactivité et des profils d'espèces similaires lors de la combustion du kérosène et du n-décane.

Kumar *et al* [21] ont étudié en 2009 les vitesses de flammes laminaires des mélanges Jet A/O_2/N_2 avec un brûleur à contre-courant. Ces travaux ont été réalisés à plusieurs températures (400, 450 et 470 K), à des richesses comprises entre 0,7 et 1,4 et à pression atmosphérique. Pour chaque température la vitesse de flamme laminaire est maximale pour des mélanges avec une richesse proche de Φ = 1,1. La Figure II.5 présente une comparaison des vitesses de flammes laminaires de kérosène Jet A et de n-décane. On observe des profils de vitesse similaires.

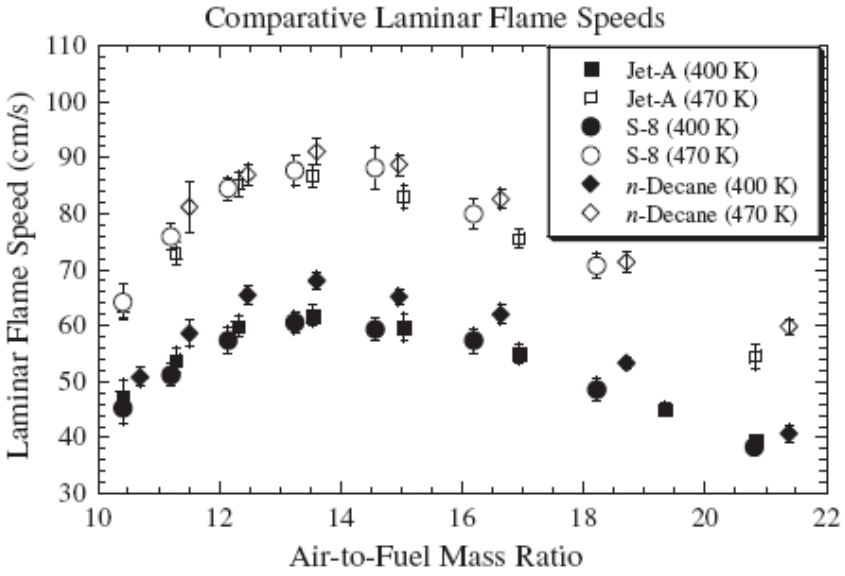


Figure II.5 : Comparaison des vitesses de flammes laminaires d'un kérosène conventionnel (Jet A), kérosène synthétique (S-8) et du n-décane [21]

Cooke *et al* [22] ont publié une étude de flammes de diffusion de kérosène JP-8 et d'un mélange représentatif en travaillant avec un brûleur à contre-courant. Ils ont mesuré des profils de températures et les limites d'extinction.

En 2009, Honnet *et al* [23] ont étudié l'oxydation du kérosène et celui d'un mélange représentatif appelé « Aachen ». Les expériences ont été faites dans un brûleur à contre courant. Le carburant de substitution est constitué de 80% n-décane et 20% 1,2,4-trimethylbenzène en volume. Ces études en flammes non pré-mélangées montrent une similitude des résultats (conditions d'extinction, d'auto-inflammation et la fraction volumique de suies formées) lors de la combustion des deux carburants.

Eigenbrod *et al* [24], Holley *et al* [25] avaient eux observé une similitude entre la combustion de carburéacteur et de n-dodécane. En 1997, Eigenbrod *et al* [24] ont observé des délais d'auto-inflammation similaires entre le n-dodécane et le kérosène. Holley *et al* [25] ont quand à eux montré des étirements à l'extinction proches pour le kérosène JP-8 et le n-dodécane dans des conditions de flamme non-prémélangées.

Référence	Dispositif exp.	Conditions expérimentales			Résultats
		T (K)	P (bar)	Φ	
Spadaccini et TeVelde [5]	réacteur à écoulement	300-1000	10-30	0,3-1	délai d'auto-inflammation
Freeman et Lefebvre [6]	réacteur à écoulement	943-1020	1	0,50	délai d'auto-inflammation
Guéret [7]	réacteur auto-agité	873-1073	0,2-1,5	1	profils d'espèces
Cathonnet *et al* [14]	réacteur auto-agité	550-1200	10-40	0,5-1,5	profils d'espèces
Dagaut *et al* [10-12]	réacteur auto-agité	550-1150	10 et 40	0,1-1,5	profils d'espèces
Dagaut *et al* [13]	réacteur auto-agité	900-1300	1	0,5-2,0	profils d'espèces
Vasu *et al* [16]	tube à choc	715-1129	17-51	0,5 et 1	délai d'auto-inflammation
Dean *et al* [17]	tube à choc	1000-1700	8	0,5 1 et 2	délai d'auto-inflammation
Gokulakrishnan *et al* [18]	réacteur à écoulement	900	1	0,3-1,5	délai d'auto-inflammation
Douté *et al* [19]	brûleur	473	1	1,7	vitesse de flamme
Kumar *et al* [21]	brûleur	400 450 et 470	1	0,7-1,4	vitesse de flamme
Honnet *et al* [23]	brûleur	298	1	0,23	l'étirement à l'extinction

Tableau II.1: Différentes études disponibles sur l'oxydation du kérosène dans la littérature

2.2.2 Mécanismes cinétiques

Guéret *et al* [8] ont montré que l'oxydation du kérosène (TR0 et Jet A-1) pouvait être simulée en utilisant le mécanisme du n-décane. Le modèle reproduit de manière correcte les principaux profils de concentrations des espèces issues de l'oxydation du kérosène en réacteur auto-agité.

Pour modéliser leurs résultats obtenus lors de l'oxydation du kérosène en réacteur auto-agité, Cathonnet *et al* [14] ont mis à jour le mécanisme détaillé du n-décane [8, 26]. En effet l'ancien modèle ne représentait pas les aromatiques identifiés lors des travaux de Dagaut et al [10, 11]. Pour ce faire, ils ont rajouté les sous-mécanismes du toluène et celui du cyclohexane. Le toluène et le cyclohexane représentent respectivement la famille des aromatiques et celles des naphtènes. Afin de simuler leurs résultats expérimentaux ils ont donc élaboré un modèle cinétique comprenant les sous-mécanismes d'oxydation du n-décane, du cyclohexane et du toluène. Le kérosène a été représenté par un mélange composé de 78% n-décane, 9,8 % cyclohexane et 12,2% de toluène en pourcentage volumique. Le nouveau mécanisme reproduisait de manière satisfaisante les principaux produits d'oxydation. Cette étude a montré la possibilité de représenter le carburant kérosène par un mélange d'hydrocarbures simples.

Voisin [27] a utilisé ce mécanisme cinétique pour modéliser les résultats obtenus en réacteur auto-agité lors de ses travaux de thèse.

En 2006, Dagaut *et al* [13] ont simulé l'oxydation du kérosène Jet A-1 à haute température en JSR en choisissant quatre carburants modèles : le n-décane (100%), un mélange n-décane/n-propylbenzène (74%/26%, mole), un mélange n-décane/n-propylcyclohexane (74%/26%, mole) et un mélange n-décane/n-propylcyclohexane/n-propylbenzène (74%/11%/15%, mole). Les résultats montrent que le dernier mélange représente correctement les profils de concentrations expérimentaux. Ce dernier modèle a aussi été validé en flamme de prémélange kérosène/O_2/N_2 [19].

En 2000, Lindstedt et Maurice [28] ont modélisé la combustion d'un kérosène en utilisant un mélange molaire constitué de 89% paraffines (décane) et 11% aromatiques

(benzène, toluène et éthylbenzène). Ils obtiennent un bon accord entre les profils d'espèces simulés et mesurés en flamme. Ce mécanisme a été validé en flamme par Douté *et al* [19]. En effet les espèces intermédiaires et radicalaires sont bien représentées par le modèle.

Plus tard Patterson *et al* [29] ont publié un mécanisme cinétique en utilisant un mélange molaire composé de 89% décane et 11% toluène. Le mécanisme a été validé en flamme par les résultats de Douté *et al* [19] et en réacteur auto-agité par Dagaut *et al* [11].

Violi *et al* ont publié en 2002 [30] un modèle cinétique semi détaillé comportant 5032 réactions et 221 espèces. Ce mécanisme a été utilisé par Cooke *et al* [22] en 2005 pour la simulation d'oxydation d'un kérosène militaire JP-8 en flamme de diffusion. Ils ont obtenu un bon accord entre les résultats simulés et mesurés en flamme (profils de températures, limites d'extinction).

Montgomery *et al* [31] ont quant à eux développé un mécanisme cinétique réduit d'oxydation du kérosène militaire JP-8 en utilisant CARM (Computer Assited Reduction Method). Un mélange molaire composé de 34,7% n-dodécane, 32,6% n-décane, 16% n-butylbenzène et 16,7% méthylcyclohexane a été utilisé pour représenter le carburant JP-8.

Le mécanisme généré par CARM a été validé en tube à choc par comparaison avec les résultats expérimentaux de Mullins [3] et de Freeman et Lefebvre [6].

En 2004, Luche *et al* [32] ont proposé un mécanisme cinétique réduit pour la modélisation de la combustion du kérosène en réacteur parfaitement agité. Le mécanisme élaboré est composé de 134 espèces et 1220 réactions.

Gokulakrishnan *et al* [18] ont développé un mécanisme cinétique d'oxydation du kérosène. Cette simulation utilise 1400 réactions et 550 espèces. Pour représenter le carburéacteur, ils ont utilisé un mélange n-décane, n-propylcyclohexane, n-propylbenzène et décène. Le mécanisme a été validé dans différentes conditions et dans différents dispositifs expérimentaux (réacteur auto-agité, tube à choc et réacteur à écoulement).

En 2010, Wang *et al* [33] ont élaboré un mécanisme cinétique détaillé de haute température nommé JetSurF 2.0 (extension du JetSurF 1.0 et du JetSurF 1.1) pour l'oxydation des carburants de substitution du kérosène. Il est composé de 348 espèces et 2163 réactions.

Le mécanisme inclut la chimie détaillée de haute température des alcanes (C_1 à C_{12}), des naphtènes dont le n-butylcyclohexane, le n-propylcyclohexane, l'éthylcyclohexane, le méthylcyclohexane et le cyclohexane. La version 2.0 regroupe aussi la chimie de basse température du cyclohexane et des cyclohexanes substitués mais nécessite quelques améliorations. Ce modèle a été validé en tube à choc, réacteur auto-agité, réacteur à écoulement, et en flamme. Ce mécanisme a été développé à partir du modèle USC-Mech II composé de 784 réactions et 111 espèces décrivant la chimie d'oxydation de H_2 et CO et celle des hydrocarbures légers C_1-C_4 à haute température.

Honnet *et al* [23] ont élaboré un mécanisme cinétique détaillé d'oxydation du kérosène « Aachen » (kérosène modèle) composé de 900 réactions et de 122 espèces. Le mécanisme a été développé en additionnant le sous mécanisme du n-décane élaboré par Bikas et Peters [34] et celui du 1,2,4-triméthylbenzène [35]. Les profils simulés reproduisent correctement les résultats obtenus en flamme par Honnet *et al*.

Antérieurement à ces travaux de modélisations, Wood *et al* [36] ont montré l'intérêt de représenter le kérosène conventionnel par des mélanges de quelques hydrocarbures appelés mélanges de substitution.

2.3 État de l'art sur la cinétique d'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions

Comme nous l'avons vu précédemment, le carburant kérosène est composé de plusieurs milliers d'hydrocarbures [37]. Les principaux constituants sont des composés paraffiniques tels que le n-décane, n-undécane, n-dodécane et le n-tétradécane comme montré par Dean *et al* [17] qui ont réalisé une analyse chromatographique d'un échantillon de kérosène de type Jet A (Figure II.9).

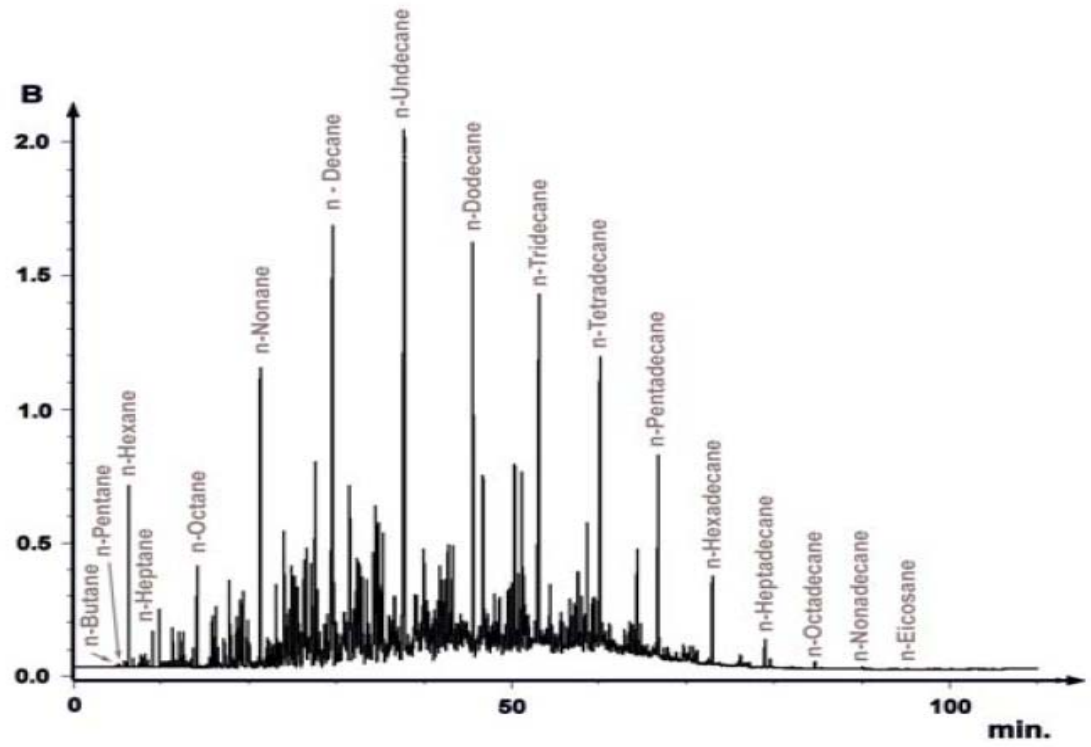


Figure II.6: Analyse d'un échantillon de kérosène de type Jet A par chromatographie en phase gazeuse [17]

Cette partie du présent mémoire résume les principales études antérieures portant sur l'oxydation des alcanes lourds.

2.3.1 Oxydation du n-décane

Les travaux antérieurs ont montré une similitude concernant la combustion du kérosène à celle du n-décane. Cette partie nous expose un résumé des principales études menées sur l'oxydation du n-décane.

2.3.1.1 Etudes expérimentales sur l'oxydation du n-décane

Dans les années 80, Cullis *et al* [38-40] ont étudié la cinétique d'oxydation du n-décane en réacteur statique, dans le régime des flammes froides, mettant en évidence la formation de produits oxygénés (aldéhydes, cétones, alcools, éthers cycliques).

Les premières études cinétiques sur l'oxydation du n-décane au CNRS d'Orléans datent des années 80-90. Balès-Guéret *et al* [41] ont étudié l'oxydation du n-décane en réacteur auto

agité par jet gazeux (JSR). Ces études ont été menées à pression atmosphérique, entre 922 et 1033 K et à des richesses comprises entre 0,2 et 1,5. Les résultats ont été obtenus pour une température constante et à un temps de passage variable (entre 0,1 et 0,25 s).

Plus tard des études réalisées par Dagaut *et al* [9, 11, 12] à une pression de 10 atm, à des températures comprises entre 550 et 1150 K et à différentes richesse (Φ = 0,1-1,5) ont abouti à des résultats compatibles avec ceux des études antérieures. L'éthylène est l'espèce intermédiaire hydrocarbonée majoritaire produite lors de l'oxydation du n-décane. Le monoxyde de carbone CO est l'espèce intermédiaire oxygénée majoritaire à basse et haute température. On observe bien les trois régimes :

-Le régime de basse température caractérisé par une oxydation lente et l'apparition d'une flamme froide ($T \leq 660$ K) et la formation de CO, CO_2 et d'autres espèces oxygénées (formaldéhyde, hétérocycles oxygénés tels que les tétrahydrofuranes substitués).

-La zone de coefficient négatif de température comprise entre 660 K et 750 K qui est caractérisée par une chute de la réactivité du système.

-Le régime de haute température ($T \geq 750$ K) caractérisé par une oxydation rapide. Dans ce domaine de haute température le méthane est l'alcane intermédiaire majoritaire produit.

Ces études furent effectuées à un temps de passage constant. Les profils de concentrations des espèces étaient donc obtenus en fonction de la température.

Des travaux plus récent sur l'oxydation du n-décane ont été publié par Dagaut *et al* [13] et Biet *et al* [42]. Dagaut *et al* ont étudié l'oxydation du n-décane entre 900 et 1300 K, à pression atmosphérique et à des richesses comprises entre 0,5 et 2. Le temps de passage est resté constant (τ = 0,07 s) tout au long des expériences. Les études de Biet *et al* ont été réalisées à des températures comprises entre 550 et 1100 K, à pression atmosphérique, en milieu stoechiométrique et à un temps de passage de 1,5 s. La majorité des composés issus de l'oxydation du n-décane obtenus lors de ces différentes études sont semblables aux anciens travaux.

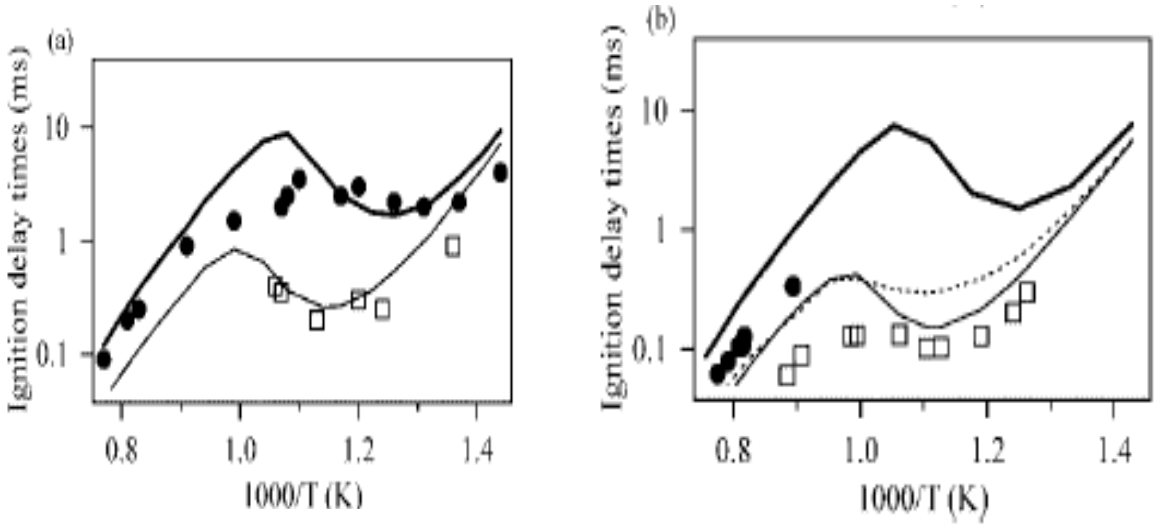
Des études cinétiques sur l'oxydation du n-décane dans d'autres dispositifs expérimentaux ont été publiées. C'est le cas des travaux menés par Zeppieri *et al* [43] dans un réacteur à écoulement. L'oxydation du n-décane a été réalisée à 1019 K et en milieu

stœchiométrique. Les résultats obtenus sont des profils de concentration des produits issus de l'oxydation du n-décane en fonction du temps de séjour.

Kumar *et al* [44] ont eux aussi réalisé une étude cinétique de l'oxydation du n-décane en machine à compression rapide entre 635 et 706 K, à $\Phi = 0,8$ et sur un large domaine de pression P = 7-30 atm.

En 1996, des travaux visant à déterminer les délais d'auto-inflammation des mélanges n-décane/oxygène/azote dans un tube à choc chauffé ont été réalisés par Pfahl *et al* [45] dans un large domaine de température 660-1200 K, à des pressions comprises à 12 et 50 bars et pour des richesses comprises entre 0,5 et 2. Les élévations respectives de la pression et du signal lumineux (vers 431 nm) ont permis de déterminer les délais d'auto-inflammation. Une auto-inflammation du mélange à basse température et une zone de coefficient négatif de température CNT furent observées.

En 2008, Zhukov *et al* [46] ont aussi mesuré des délais d'auto-inflammation au moyen d'un tube à choc. Les résultats ont été obtenus entre 800 et 1300 K, à des pressions de 13 et 80 bars et à des richesses égales à 0,5 et 1. Les délais ont été déterminés comme étant le temps qui sépare l'onde de choc incidente et le maximum du pic d'émission des radicaux hydroxyles OH (309 nm). Comme nous montre la Figure II.7, les résultats obtenus lors de ces travaux sont conformes avec ceux obtenus par Pfahl *et al* [45] dans les mêmes conditions expérimentales.



a) ●: P=12 bar (Pfahl *et al* [45])
□: P=50 bar (Pfahl *et al* [45])

b) ●: P=13 bar (Zhukov *et al* [46])
□: P= 80 bar (Zhukov *et al* [46])

Figure II.7: Délais d'auto-inflammation (ms) de mélanges stoechiométriques n-décane/oxygène/azote (trait: modèle issu de l'étude de J. Biet *et al* [42], pointillé: modèle de Buda *et al*. [78])

Plus récemment en 2009 Shen *et al* [47] ont déterminé des délais d'auto-inflammation de mélanges n-décane/air entre 786 et 1396 K, à différentes richesses (Φ =0,25; 0,5 et 1) et à des pressions variant de 9 à 58 atm. Les délais mesurés ont été caractérisés selon l'émission des radicaux OH tout en mesurant la pression (Figure II.8).

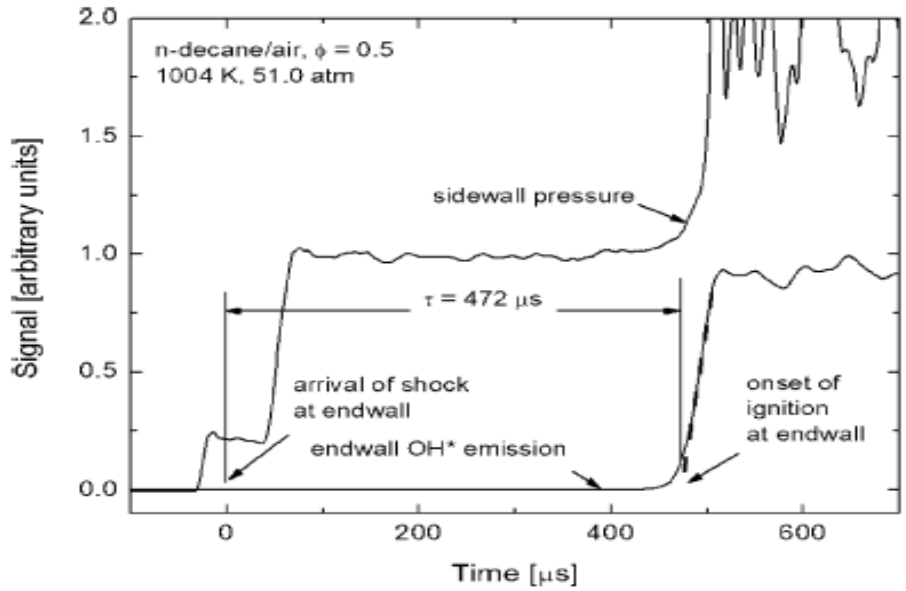


Figure II.8 : Exemple de mesure de délais d'auto-inflammation en tube à choc chauffé [47]

Comme dans les anciennes études, ils ont observé la présence d'une zone de coefficient négatif de température (T < 1000 K). Les résultats montrent que les délais mesurés diminuent avec l'augmentation de la pression et de la richesse.

Par ailleurs, on dénombre dans la littérature d'autres études portant sur les délais d'auto-inflammation du n-décane effectuées en tube à choc dans d'autres conditions expérimentales (Horning *et al* [48], Davidson *et al* [49] et Skjøth-Rasmussen et al [50]).

Outre les mesures des profils d'espèces et les délais d'auto-inflammation, on trouve des travaux réalisés sur les vitesses de flamme du n-décane. En effet des études dans différentes conditions expérimentales sur les flammes de prémélange décane/oxygène/azote ont été publiées par Wagner et Duger [51], Skjøth-Rasmussen *et al* [50] et Zhao *et al* [52].

Plus récemment, en 2007, Kumar et Sung [53] ont mesuré les vitesses de flammes des mélanges n-décane/air en fonction de la richesse grâce à un brûleur à contre-courant pour des températures équivalentes à 360 K, 400 K et 470 K, à pression atmosphérique et pour des richesse comprises entre 0,7 et 1,4. Les profils de vitesse obtenus concordent bien avec les études précédentes. La comparaison de ces différentes études a montré que la vitesse de flamme laminaire atteint son maximum pour une richesse proche de la stoechiométrie (Φ proche de 1,1). Pour $\Phi = 1,1$ on a des vitesses de flammes laminaires maximales de 90 $cm.s^{-1}$, 96 $cm.s^{-1}$ et 97 $cm.s^{-1}$ selon respectivement pour Kumar et Sung [53], Zhao *et al* [52] et Rasmussen *et al* [50].

Ji *et al* [54] ont travaillé à T = 403 K, à pression atmosphérique et à des richesses comprises entre 0,7 et 1,5. Comme dans les autres expériences, citées précédemment, la vitesse de flamme laminaire est maximale à $\Phi = 1,1$.

Les structures de flammes de prémélanges n-décane/air ont aussi été étudiées. L'installation utilisée pour ces travaux est un brûleur à flamme plate. Delfau *et al* [55] et Douté *et al* [19] ont publié des travaux à ce sujet. Ils ont aussi évalué la structure de flamme pour une température égale à 473 K, à pression atmosphérique et à $\Phi = 1,7$.

Référence	Dispositif exp.	Conditions expérimentales			Résultats
		T (K)	P (bar)	Φ	
Balès-Guéret *et al* [41]	réacteur auto-agité	922-1033	1	0,2-1,5	profils d'espèces
Dagaut *et al* [9,11,12]	réacteur auto-agité	550-1150	10 et 40	0,1-1,5	profils d'espèces
Dagaut *et al* [13]	réacteur auto-agité	900-1300	1	0,5-2,0	profils d'espèces
Biet *et al* [42]	réacteur auto-agité	550-1100	1	1	profils d'espèces
Zeppieri *et al* [43]	réacteur à écoulement	1019	1	1	profils d'espèces
Kumar *et al* [44]	machine à compression rapide	635-706	7-30	0,8	délais d'auto-inflammation profils d'espèces
Pfahl *et al* [45]	tube à choc	700-1300	12 et 50	0,5-2	délais d'auto-inflammation
Shen *et al* [47]	tube à choc	786-1396	9-58	0,25 0,5 et 1	délais d'auto-inflammation
Horning *et al* [48]	tube à choc	1450-1550	1	1	délais d'auto-inflammation
Davidson *et al* [49]	tube à choc	1357-1706	2	0,8-1,2	délais d'auto-inflammation profils de OH
Skjøth-Rasmussen *et al* [50]	tube à choc brûleur	1345-1537 473	5-6 1	0,5-1,3 0,8-1,3	délais d'auto-inflammation vitesse de flamme
Wagner et Duger [51]	brûleur	300	1	1,05	vitesse de flamme
Zhao *et al* [52]	brûleur	300	1	0,6-1,4	vitesse de flamme
Kumar et Sung [53]	brûleur	360 400 et 470	1	0,7-1,4	vitesse de flamme
Ji *et al* [54]	brûleur	403	1	0,7-1,5	vitesse de flamme
Delfau *et al* [55]	brûleur	473	1	1,7	Structure de flamme
Douté *et al* [19]	brûleur	473	1	1,7	Structure de flamme

Tableau II.2 : Différentes études (non exhaustif) disponible sur l'oxydation du n-décane dans la littérature

Le tableau ci-dessus présente un récapitulatif non exhaustif des études publiées sur l'oxydation du n-décane dans plusieurs dispositifs expérimentaux (réacteur auto-agité, réacteur à écoulement, machine à compression rapide, tube à choc et brûleur) et sous différentes conditions.

2.3.2 Oxydation du n-undécane

On ne trouve pas d'études dans la littérature portant sur l'oxydation du n-undécane. Les travaux menés au cours de cette thèse seront donc les premiers sur le sujet.

2.3.3 Oxydation du n-dodécane

Tout comme le n-décane, le n-dodécane est souvent utilisé pour représenter les alcanes présents dans les carburéacteurs [30, 56-59]. Le n-dodécane est l'un des composés majeurs présents dans certains types de carburéacteur (Jet A, JP-7 et JP-8) [30, 31, 60, 61]

Herbinet *et al* [62] ont effectué des expériences sur la décomposition du n-dodécane en réacteur auto-agité entre 773 et 1073 K, à pression atmosphérique et à des temps de passage compris entre 1 et 5 s. Les principaux produits détectés sont l'hydrogène, le méthane, l'éthane, le 1,3-butadiène, les alcènes allant de l'éthylène jusqu'au 1-undécène. Pour des températures et temps de passages élevés ils ont identifié l'acétylène, l'allène, le propyne, le cyclopentène, le 1,3-cyclopentadiène et des composés aromatiques tels que le benzène et le naphtalène.

Lenhert *et al* [63] ont mené une étude sur l'oxydation du n-dodécane à basse température en réacteur à écoulement à 8 atm en milieu pauvre (Φ = 0,25). Les profils de concentration des espèces ont été obtenus entre 600 et 800 K et à un temps de passage de 0,125 s. Ce domaine de basse température s'accompagne d'une zone de coefficient négatif de température entre 700 et 800 K caractérisée par la diminution de la production de CO. Ils ont aussi identifié le CO_2 ainsi que des alcènes et aldéhydes à faibles masses molaires. Agosta *et al* [61] ont également travaillé sur l'oxydation du n-dodécane en réacteur à écoulement.

Auparavant, Blin-Simiand *et al* [64] avaient aussi étudié l'oxydation du n-dodécane à basse température en réacteur à écoulement. Ils ont identifié des peroxydes au moyen de la spectrométrie de masse (SM).

Davidson *et al* [65] ont réalisé des travaux sur l'oxydation du n-dodécane en tube à choc à des températures comprises entre 1050 et 1330 K, en milieu pauvre et à 7 atm. Plus récemment, en 2011, Davidson *et al* [66] ont publié des mesures de concentration de cinq espèces derrière l'onde de choc réfléchie (n-dodécane, C_2H_4, OH, CO_2 et H_2O) lors de l'oxydation des mélanges n-dodécane/oxygène/argon en tube à choc entre 1300 et 1600 K, à des pressions voisines de 2 atm et à $\Phi = 1$.

Vasu *et al* [16] ont mesuré les délais d'auto-inflammation de mélanges n-dodécane/air en utilisant un tube à choc chauffé dans un large domaine de température (727-1422 K) et de pression (15-34 atm) en milieu pauvre ($\Phi = 0,5$) et à la stoechiométrie. Pour des températures supérieures à 1000 K, les délais mesurés diminuent avec l'augmentation de la température alors qu'à plus basse température une région de CTN est observée. Elle est caractérisée par une baisse des délais d'auto-inflammation avec la diminution de la température. Les expériences ont aussi montré que les délais mesurés en milieu pauvre sont plus longs que ceux mesurés à la stoechiométrie. Ils ont également effectué une comparaison des délais d'auto-inflammation du n-dodécane et du kérosène Jet A (Figure II.4) et ont obtenus des profils similaires.

En 2009, Shen *et al* [47] ont publié des mesures des délais d'auto-inflammation d'alcanes, dont le n-dodécane, en utilisant un tube à choc chauffé. Les expériences ont été effectuées entre 786 et 1396 K, à des pressions comprises entre 9 et 58 atm et à différentes richesses ($\Phi = 0,25$, 0,5 et 1). Les délais ont été définis en suivant l'émission des radicaux OH et en mesurant la pression. Comme avec le n-décane, une zone de CNT a été observée pour des températures inférieures à 1000 K.

En 2000 les études de Segawa *et al* [67] sur l'oxydation du n-dodécane ont montré l'existence d'une relation entre le délai d'auto-inflammation et la taille des gouttelettes. En effet les résultats obtenus indiquent une augmentation des délais avec l'augmentation de la taille des gouttelettes du n-dodécane.

Holley *et al* [25, 68] ont mesuré les températures d'auto-inflammation et l'étirement à l'extinction des flammes non prémélangés n-dodécane/air au moyen d'un brûleur à contre-courant. Ils ont montré des étirements à l'extinction proches entre le JP-8 et le n-dodécane. Ces études de flammes ont également montré que les hydrocarbures légers étaient plus résistants à l'extinction de la flamme que les hydrocarbures lourds tels que le kérosène et le n-dodécane.

D'autres études ont été menées avec un brûleur à contre-courant par Kumar et Sung [53]. Ces derniers ont mesuré les vitesses de flammes laminaires des mélanges n-dodécane/air en fonction de la richesse (Φ = 0,7-1,4) pour des températures correspondantes à 400 et 470 K. Les résultats ci-dessous (Figure II.9) montrent que les vitesses de flammes laminaires mesurées pour les mélanges n-dodécane/O_2/N_2 sont inférieures à celles du mélange décane/O_2/N_2.

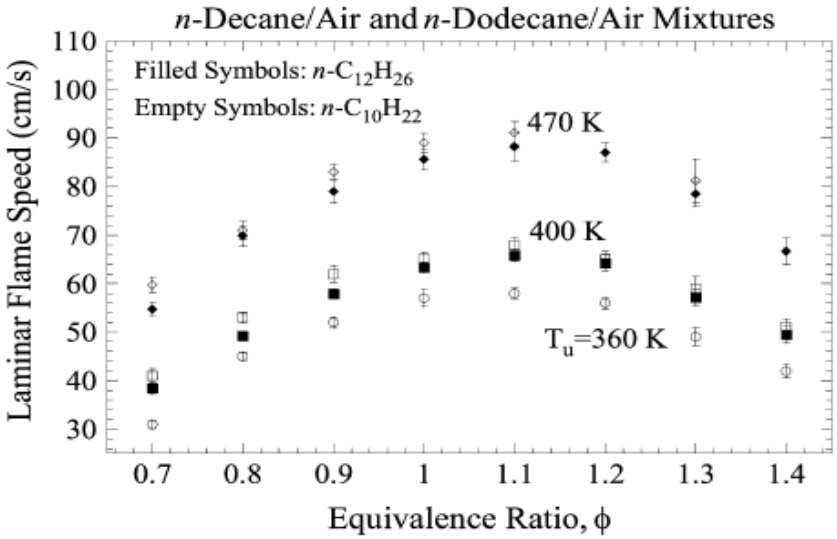


Figure II.9: Comparaison des vitesses de flammes laminaires des mélanges n-décane/air (T=360, 400 et 470 K) et n-dodécane/air (T = 400 et 470 K) [53]

Cooke *et al* [22] ont également mesuré l'étirement à l'extinction des flammes non prémélangées n-dodécane/air.

Ji *et al* [54] ont publié une étude sur les vitesses de flammes laminaires des mélanges n-dodécane/air Ils ont aussi mesuré l'étirement à l'extinction des flammes de mélanges n-dodécane/air. Ces travaux ont été réalisés avec un brûleur à contre-courant à T = 403 K, à pression atmosphérique et à des richesses comprises entre 0,7 et 1,5.

Karwat *et al* [69] ont récemment publié leurs travaux sur l'oxydation du n-dodécane en machine à compression rapide entre 750 et 800 K, à 3,25 atm et à Φ = 1. Cette étude montre que l'inflammation de l'hydrocarbure est très sensible aux conditions de pressions et de températures.

Le Tableau II.3 présente un récapitulatif des principaux travaux portant sur l'oxydation du n-dodécane

Référence	Dispositif exp.	Conditions expérimentales			Résultats
		T (K)	P (bar)	Φ	
Herbinet *et al* [62]	réacteur auto-agité	773-1073	1	-	profils d'espèces
Lenhert *et al* [63]	réacteur à écoulement	600-800	8	0,25	profils d'espèces
Agosta *et al* [61]	réacteur à écoulement	600-900	8	0,2-0,3	profils d'espèces
Blin-Simiand *et al* [64]	réacteur à écoulement	498 et 518	1	0,7	profils d'espèces
Davidson *et al* [65]	tube à choc	1050-1330	7	0,5	délai d'auto-inflammation
Davidson *et al* [66]	tube à choc	1300-1600	2	1	délai d'auto-inflammation profils d'espèces
Vasu *et al* [16]	tube à choc	727-1422	15-34	0,5 et 1	délai d'auto-inflammation profils de OH
Shen *et al* [47]	tube à choc	786-1396	9-58	0,25 0,5 et 1	délai d'auto-inflammation
Segawa *et al* [67]	chambre de combustion	298	1	0,8	délai d'auto-inflammation
Kumar et Sung [53]	brûleur	400 et 470	1	0,7-1,4	vitesse de flamme
Ji *et al* [54]	brûleur	403	1	0,7-1,5	vitesse de flamme

Tableau II.3 : Résumé non exhaustif des travaux menés sur l'oxydation du n-dodécane

2.3.4 Oxydation du n-tétradécane

Cette partie récapitule les travaux effectués sur l'oxydation du n-tétradécane. On trouve peu d'études dans la littérature portant sur l'oxydation de cet alcane lourd.

Tout comme les autres alcanes étudiés, le n-tétradécane est présent dans le kérosène [17, 70, 71]. Dean et al [17] ont ainsi identifié le n-tétradécane dans un carburéacteur conventionnel Jet A.

En 1993, Cavaliere *et al* [72] ont publié des travaux portant sur l'oxydation du n-tétradécane. Ils ont étudié l'auto-inflammation du n-tétradécane en mesurant les délais d'auto-inflammation au moyen d'un réacteur à écoulement.

Auparavant, Ciajolo *et al* [73] avaient étudié la combustion du n-tétradécane en utilisant un moteur Diesel. Les produits de pyrolyse majoritaires qui ont été identifiés sont l'acétylène et les suies.

Shen *et al* [47] ont mesuré les délais d'auto-inflammation du n-tétradécane en tube à choc entre 786 et 1396 K, en milieu pauvre (Φ = 0,25 et 0,5), à la stoechiométrie, et à haute pression (9-58 atm). Les délais ont été déterminés en suivant l'émission des radicaux hydroxyles et en mesurant la pression. Ils ont remarqué le même comportement à basse température qu'avec les autres alcanes lourds étudiés (n-décane et n-dodécane) en observant la présence d'une zone de coefficient négatif de température (CNT).

Les études réalisées en flammes par Holley *et al* [25] montrent que le n-tétradécane a des caractéristiques d'inflammation similaires à l'iso-octane.

2.3.5 Mécanismes cinétiques pour l'oxydation d'alcanes lourds

Les premiers travaux de modélisation de l'oxydation des alcanes lourds débutent en 1992 avec Chevalier *et al* [74]. Le mécanisme développé fut validé par Pfahl *et al* [75] en tube à choc en simulant des délais d'auto-inflammation du n-décane pour une pression de 12 bars.

En 2002 l'équipe de Warnatz [76] propose un mécanisme cinétique pour l'oxydation du n-décane en utilisant le code HOMREA. Ce mécanisme détaillé est composé de 4177 réactions et 1253 espèces. Il permet de modéliser les résultats obtenus en réacteur auto-agité JSR et en tube à choc. Il a été validé en tube à choc par les résultats obtenus par Pfahl *et al* [75] et en JSR par les expériences menées par Dagaut *et al* [9]. En effet les résultats simulés reproduisent correctement les résultats obtenus expérimentalement.

Dagaut *et al* [9] ont modélisé leurs résultats obtenu en 1994 pour l'oxydation du n-décane en réacteur auto-agité entre 550 et 1150 K, à 10 bar et à des richesses comprises entre 0,5 et 1. Le modèle reproduit bien les résultats expérimentaux dans le domaine de haute température (T > 800 K). Ce qui n'est pas le cas à de plus faibles températures.

Les résultats obtenus par Dagaut *et al* [9] ont permis à Battin-Leclerc *et al* [77] de valider leur mécanisme de basse température sur l'oxydation du n-décane. La zone de coefficient négatif de température est bien représentée. Ce mécanisme généré par EXGAS (7920 réactions) a aussi permis de simuler les résultats obtenus en réacteur auto-agité par Balès-Guéret *et al* [41] et ceux obtenus par Delfau *et al* [55] en brûleur pour une flamme plate de prémélange n-décane/air.

Le mécanisme de Battin-Leclerc *et al* [77] a ensuite été mis à jour et repris par Buda *et al* [16] pour modéliser les délais d'auto-inflammation obtenus en tube à choc par Pfahl *et al* [75]. Ils obtiennent un bon accord à 12 bars. Toutefois les profils simulés reproduisent mal les résultats expérimentaux à 50 bars.

Plus tard, en 2008, Zhukov *et al* [46] ont utilisé le modèle de Buda *et al* [78] pour simuler leurs mesures en tube à choc entre 600 et 1200 K. Ils obtiennent un bon accord pour une pression correspondante à 13 bars, alors qu'à 80 bars, les délais simulés sont surestimés.

En 1997, Douté *et al* [79] ont modélisé leurs résultats obtenus en brûleur à flamme plate à 473 K, pression atmosphérique et à $\Phi = 1,7$. Ils obtiennent un bon accord entre les profils d'espèces simulés et expérimentaux obtenus en flamme de prémélange n-décane/air. Le mécanisme élaboré comporte 638 réactions et 78 espèces.

Bikas et Peters [34] ont élaboré en 2001 un mécanisme semi-détaillé comportant 600 réactions et 67 espèces. Il permet de simuler l'oxydation du n-décane dans différents dispositifs expérimentaux. Le mécanisme a ainsi été validé en tube à choc par les expériences de Pfahl *et al* [75], en réacteur auto-agité par Dagaut *et al* [11] et en flamme par Bradley *et al* [80] et Douté *et al* [19, 79].

En 2005, Zhao *et al* [52] ont modélisé les vitesses de flammes laminaires de mélanges n-décane/air. Ils obtiennent un bon accord pour des températures élevées.

Zeppieri *et al* [43] ont développé un mécanisme pour l'oxydation du n-décane. Il a été validé en réacteur à écoulement, réacteur auto-agité avec les résultats de Balés-Guéret *et al* [41] et en tube à choc en utilisant les délais de Pfahl *et al* [75].

Ranzi *et al* ont élaboré un mécanisme cinétique semi-détaillé pour l'oxydation du n-décane [81, 82] et du n-dodécane [82]. Le mécanisme d'oxydation du n-décane a été validé en tube à choc avec les délais de Pfahl *et al* [75] à 12 et 50 bar et en réacteur auto-agité [16, 69-74]. Le modèle développé pour l'oxydation du n-dodécane a été validé en réacteur à écoulement en utilisant les résultats d'Agosta *et al* [61] et de Lenhert *et al* [63] entre 600 et 800 K, à 8 bar et à des richesses comprises entre 0,2 et 0,3.

Westbrook *et al* [83] ont développé en 2009 un mécanisme cinétique détaillé pour la combustion des alcanes lourds allant du n-octane au n-hexadécane à basse et haute température. Le mécanisme modélise correctement les résultats obtenus en tube à choc par Pfahl *et al* [75] et Zhukov *et al* [46] à 12 bars. Le modèle surestime les délais pour des pressions plus élevées (50 et 80 bars). Un bon accord a été obtenu entre les profils d'espèces mesurées lors de l'oxydation du n-décane en réacteur auto-agité par Dagaut *et al* [12] et les profils simulés. Le mécanisme a également été validé dans d'autres conditions, i.e. machine à compression rapide et flamme.

Le mécanisme utilisé pour modéliser le n-décane est composé de 3878 réactions et 940 espèces alors que celui du n-dodécane contient 5030 réactions et 1283 espèces.

En 2009, Sirjean *et al* [84] proposent un mécanisme cinétique de haute température nommé JetSurF 0.2. Ce mécanisme détaillé composé de 1459 réactions et 194 espèces est utilisé pour modéliser la pyrolyse et l'oxydation des alcanes allant jusqu'au n-dodécane. Le

mécanisme a été validé sur les résultats en tube à choc, réacteur auto-agité, réacteur à écoulement, et en flamme. Il a permis de simuler des délais d'auto-inflammation, des profils d'espèces ainsi que des vitesses de flammes laminaires. Plus tard Wang *et al* [33] ont développé un mécanisme en incluant la chimie des naphtènes (cyclohexane monosubstitué) afin de modéliser la combustion de kérosène synthétique.

En 2005, l'équipe de Zhang [85] a publié un mécanisme nommé « The Utah Surrogate Mechanism Version 3 beta » composé de 1087 réactions et 208 espèces. Kumar et Sung [53] ont utilisé ce mécanisme (en apportant quelques modifications) pour simuler les vitesses de flammes laminaires de mélanges n-dodécane/air.

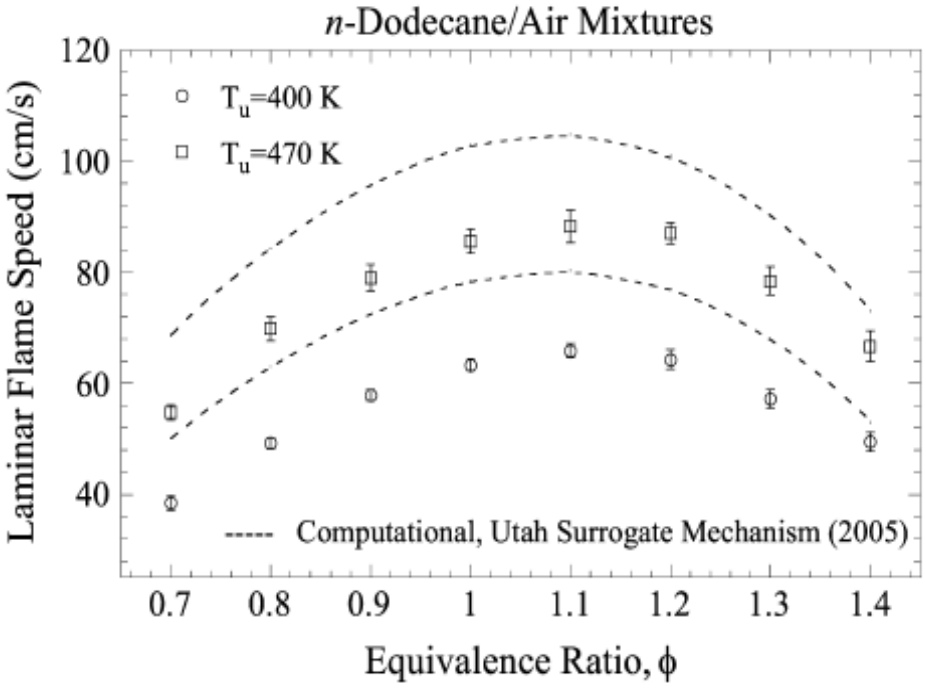


Figure II.10 : Confrontations expériences (symboles) et modèles (pointillés) pour des vitesses de flammes laminaires de mélanges n-dodécane/air à 400 et 470 K [53]

Le modèle (Utah Surrogate Mechanism) surestime les valeurs mesurées en flamme par Kumar et Sung à 400 et 470 K.

Le mécanisme de Violi *et al* [30] a permis de simuler les résultats obtenus pour une flamme non-prémélangée n-dodécane/air mesurés par Cooke *et al* [22]. Le modèle reproduit convenablement les profils de températures et les limites d'extinction mesurés.

You *et al* [86] ont élaboré un mécanisme cinétique pour l'oxydation des alcanes allant jusqu'au n-dodécane. Le mécanisme a été validé par confrontation avec des résultats obtenus

en réacteur auto-agité [62], réacteur à écoulement [87], tube à choc [48] et en flamme [53, 88].

2.4 État de l'art sur la cinétique d'oxydation de kérosènes reformulés

Les études portant sur l'oxydation de kérosènes reformulés sont peu relativement nombreuses dans la littérature. Cependant, ces dernières années les recherches concernant les carburéacteurs de synthèses ont augmenté.

2.4.1 Études expérimentales

En 2007 Dagaut et Gail [89] ont mené une étude cinétique sur l'oxydation d'un kérosène reformulé et d'un kérosène conventionnel Jet A-1. Le kérosène reformulé était constitué d'un mélange molaire kérosène/RME (ester méthylique d'huile de colza) 80%/20%, en réacteur auto-agité. Les expériences ont été menées entre 740 et 1200 K, à une pression correspondante à 10 atm et à des richesses comprises entre 0,5 et 1,5. Ils ont observé un comportement similaire entre la combustion du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/RME (le bio-kérosène étant légèrement plus réactif que le kérosène conventionnel).

En effet les profils de concentration des principales espèces intermédiaires obtenus lors de deux séries d'expériences sont pratiquement identiques. Cette similitude s'explique par la présence de la longue chaîne alkyle fortement saturée dans le RME et de la forte proportion de n-alcanes dans le Jet A-1. Cependant lors de l'oxydation du bio-kérosène, Dagaut et Gail ont pu identifier la formation d'esters méthyliques insaturés légers provenant de l'oxydation du RME.

Dans la même année, Corporan *et al* [90] ont réalisé des expériences sur l'oxydation de trois carburants:

- un kérosène synthétique (synjet) produit par synthèse Fischer-Tropsch (F-T) via du gaz naturel (constitué majoritairement d'iso-paraffines)
- un mélange de kérosène conventionnel destiné à l'aviation militaire (JP-8) et de kérosène synthétique
- un kérosène militaire, le JP-8

Ils ont comparé les émissions polluantes de ces différents carburants. Les travaux ont été menés à l'aide d'un turbomoteur T63 et d'une chambre de combustion. Les analyses montrent une réduction des émissions de particules (90%), de HAP (il n'y a pratiquement pas d'aromatiques dans le kérosène synthétique) et des émissions de SO_x (il n'y a pas de soufre dans le kérosène synthétique) avec l'utilisation du kérosène de synthèse pur. Concernant le mélange (JP-8/kérosène de synthèse), la réduction des émissions dépend de la proportion de carburant de synthèse dans le carburant.

D'autres travaux [91-94] montrant les avantages des carburants de synthèse Fischer-Tropsch pour la réduction des émissions de particules de suies ont également été publiés.

En 2008, Kahandalawala *et al* [95] ont étudié l'oxydation de quatre carburants destinés aux aéronefs dont un kérosène de synthèse S-8 (produit par la synthèse F-T), un kérosène conventionnel JP-8, un mélange représentatif du JP-8 (80% heptane et 20% toluène volumique) et du S-8 (2-methylheptane). Ils ont réalisé leurs travaux dans un tube à choc entre 1100 et 1950 K, à une pression de 21 atm et à deux richesses $\Phi = 0,5$ et 3. Ils ont montré que dans les mêmes conditions expérimentales les deux carburants de synthèses produisent moins de particules de suies et d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) que le kérosène de substitution et le JP-8. Leurs résultats sont en accord avec ceux obtenus en turbomoteur T63 par Corporan *et al* [90]. Les profils des délais d'auto-inflammation mesurés pour les quatre carburants sont similaires (Figure II.11). Les auteurs montrent qu'il n'y a pas de lien direct entre la formation de suies et les délais d'auto-inflammation.

Notons que les carburants utilisés pour représenter le kérosène JP-8 et le kérosène de synthèse S-8 ne sont pas très représentatifs des carburéacteurs.

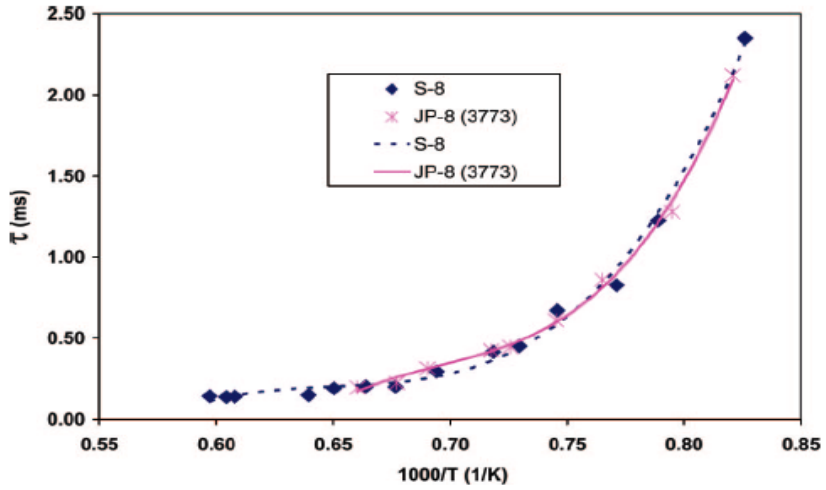


Figure II.11 : Délais d'auto-inflammation mesurés en tube à choc à Φ = 0,5 [95]

Pour représenter les iso-paraffines présentes dans le carburéacteur de synthèse, Colket *et al* [54] ont proposé le 2-méthylundécane. Mais, cet hydrocarbure est difficile à obtenir en quantités importantes alors que des composés similaires sont commercialement disponibles.

Ainsi, afin de mieux comprendre le comportement de la combustion des iso-paraffines présentes dans les carburéacteurs synthétiques, Sarathy *et al* [96] ont publié une étude de l'oxydation du 2-méthylheptane. Le n-octane a aussi été étudié pour comparer les résultats de la combustion entre ces deux isomères. Ces études de flammes ont été effectuées à l'aide d'un brûleur à contre-courant. D'une part, ils ont observé des concentrations identiques pour les deux flammes concernant le CO, CO_2, CH_4, C_2H_6 et C_2H_2. D'autre part l'oxydation du 2-méthylheptane forme plus de C_3H_6 et des 2-méthylalcènes tels que l'isobutène (i-C_4H_8) alors que l'oxydation du n-octane forme plus de 1-alcènes (1-C_5H_{10} et 1-C_6H_{12}) et de l'éthylène.

Huber *et al* [70] ont quand à eux mené des travaux sur un carburant de substitution du kérosène synthétique S-8 contenant principalement du 3-méthyldécane et 2,6-diméthyloctane. Ils ont déterminé la volatilité (ainsi que d'autres propriétés thermo-physiques : densité et viscosité) du carburant au moyen d'un appareil de distillation.

Gokulakrishnan *et al* [97] ont à leur tour étudié l'oxydation d'un kérosène synthétique S-8 et un kérosène JP-8 en réacteur à écoulement. Ils ont mesuré les délais d'auto-inflammation entre 900 et 1200 K, à pression atmosphérique et à des richesses comprises entre 0,5 et 1,5. Ils observent un délai plus court pour le kérosène de synthèse. Cela s'explique

par l'absence de composés aromatiques dans le S-8. En effet les aromatiques présents dans le JP-8 s'auto-enflamment difficilement.

Kumar et Sung [98] ont mesuré les délais d'auto-inflammation de mélanges S-8/air en machine à compression rapide à basse température entre 615 et 933 K, à des richesses variant entre 0,43 et 2,29 et à des pressions de 7, 15 et 30 bars. Le kérosène synthétique S-8 utilisé a été fabriqué par la société Syntroleum. Il est produit par la synthèse F-T à partir du gaz naturel (GTL). Ils observent une auto-inflammation en deux stades et une zone de coefficient négatif de température entre 690 et 760 K, spécifique des hydrocarbures lourds. Une étude comparative faite dans les mêmes conditions expérimentales avec le kérosène S-8 et des kérosènes conventionnels (Jet A et JP-8) montrent un comportement similaire des carburants. Toutefois, le carburant synthétique s'auto-enflamme plus rapidement que les deux autres carburants. Ceci se traduit par des délais d'auto-inflammation plus courts pour le kérosène S-8, comme nous le montre la Figure II.12.

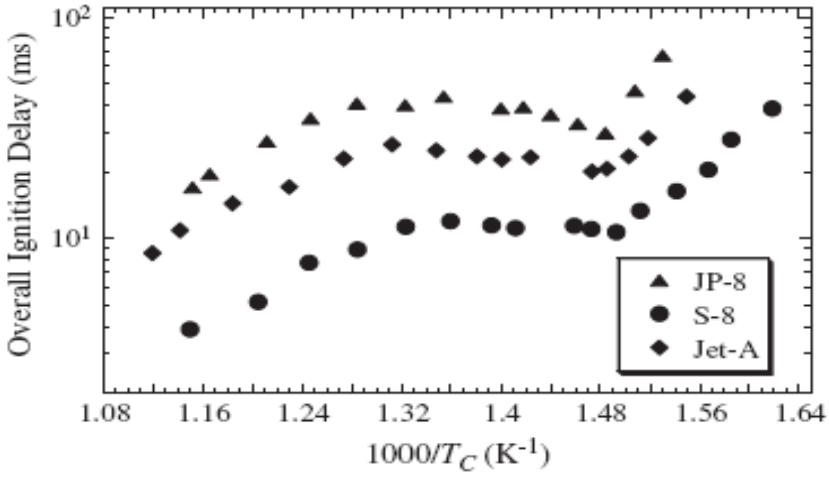


Figure II.12: Comparaison des délais d'auto-inflammation des mélanges S-8/air, Jet A/air et JP-8/air, à 7 bars, avec un rapport massique oxygène/carburant de 13 [98]

Kumar *et al* [21] ont étudié en 2009 les vitesses de flammes laminaires et l'étirement à l'extinction des flammes de mélanges S-8/O_2/N_2 en utilisant un brûleur à contre-courant. Comme précédemment, le carburant S-8 est un kérosène synthétique produit à partir de la synthèse F-T. Ces travaux ont été réalisés à différentes températures (T = 400, 450 et 470 K), à pression atmosphérique et à des richesses comprises entre 0,7 et 1,4. Tout comme avec le kérosène Jet A, ils ont obtenu des vitesses de flammes laminaires maximales pour des mélanges ayant une richesse proche de la stœchiométrie. Cette étude a permis de comparer les

vitesses de flammes laminaires d'un kérosène conventionnel de type Jet A, d'un kérosène synthétique et du n-décane (voir la Figure II .5). Ils ont observé des profils de vitesse pratiquement identique pour le kérosène conventionnel Jet A et kérosène de synthèse S-8. Ces deux carburants possèdent les mêmes caractéristiques (vitesse de flamme laminaire, étirement à l'extinction des flammes) en terme de propagation des flammes.

Ji *et al* [99] ont aussi réalisés des travaux sur les vitesses de flammes laminaires et l'étirement à l'extinction des flammes des mélanges S-8 (Syntroleum)/air, GTL(Shell)/air et R-8/air. Ils ont obtenus des résultats similaires pour les trois carburéacteurs alternatifs. Les résultats obtenus en flamme lors de l'oxydation du n-dodécane [54] sont similaires à ceux obtenus pour l'oxydation des kérosènes de synthèses (S-8 et GTL, Shell) et du bio-kérosène (R-8, kérosène issu de la biomasse) [99].

Référence	**Dispositif exp.**	**Conditions expérimentales**			**Résultats**
		T (K)	**P (bar)**	**Φ**	
Dagaut et Gail [89]	réacteur auto-agité	740-1200	10	0,5-1,5	profils d'espèces
Corporan *et al* [90]	chambre de combustion	450,15	1,5-10	0,6-1,1	émissions profils d'espèces
Kahandalawala *et al* [95]	tube à choc	1100-1950	21	0,5 et 3	émissions délais d'auto-inflammation
Gokulakrishnan *et al* [97]	réacteur à écoulement	900-1200	1	0,5-1,5	délai d'auto-inflammation
Kumar et Sung [98]	machine à compression rapide	615-933	7 15 et 30	0,43-2,29	délai d'auto-inflammation
Kumar *et al* [21]	brûleur	400 450 470	1	0,7-1,4	vitesse de flamme
Ji *et al* [99]	brûleur	403	1	0,04-0,1	vitesse de flamme NO_x

Tableau II.4 : Résumé non exhaustif des travaux disponibles dans la littérature pour l'oxydation de kérosène reformulé

En conclusion nous pouvons dire que les travaux, qui ont été réalisés antérieurement au moyen de différents dispositifs expérimentaux, ont montré un comportement similaire en combustion de kérosènes conventionnels alternatifs (kérosène synthétique et bio-kérosène).

2.4.2 Mécanismes cinétiques

Pour simuler leurs résultats obtenus lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (80/20 molaire), Dagaut et Gail [89] ont utilisé un mécanisme cinétique détaillé constitué des sous mécanismes du n-décane, n-propylcyclohexane, n-propylbenzène et du n-hexadécane. Le mécanisme est composé de 2027 réactions et 263 espèces. Le mélange composé du décane-propylcyclohexane-propylbenzène a été choisi pour représenter l'oxydation du kérosène conventionnel [13] et l'hexadécane celui de l'ester méthylique d'huile de colza [100, 101]. Les résultats simulés représentent convenablement les profils expérimentaux. Une analyse des voies réactionnelles montre le rôle déterminant du n-décane et du n-hexadécane dans l'oxydation du mélange Jet A-1/RME. En effet le n-décane et le n-hexadécane sont responsables de la formation de radicaux hydroxyles. Ces radicaux sont majoritairement responsables de l'oxydation du carburant.

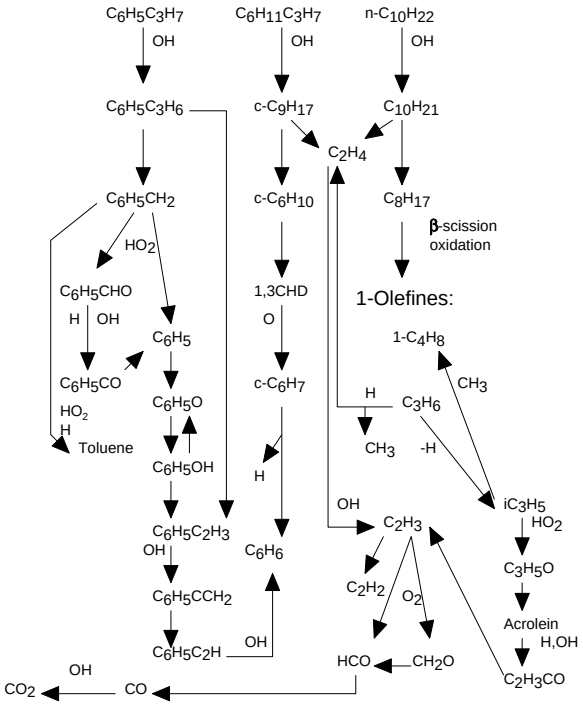


Figure II.13: Voies de dégradation principales des quatre constituants du carburant modèle utilisé pour simuler l'oxydation du mélange Jet A-1/RME en JSR (T = 900K, P =10 atm, Φ = 1) [89]

Les carburéacteurs synthétiques ont une composition moins complexe que les carburéacteurs conventionnels. Ils sont composés de plusieurs dizaines à des centaines d'hydrocarbures [102]. La composition varie selon le procédé de fabrication utilisé. Des mélanges de n-paraffines et d'iso-paraffines sont généralement utilisés comme carburant modèle pour représenter les kérosènes alternatifs (kérosène synthétique et bio-kérosène).

Ainsi, Naik *et al* [102] ont récemment développé un mécanisme cinétique détaillé pour l'oxydation de trois carburéacteurs reformulés: S-8, GTL (Shell) et R-8. Pour ce faire, ils ont utilisé un mélange de substitution n-décane/n-dodécane/iso-octane pour la modélisation de la combustion des carburéacteurs reformulés. Le mécanisme est donc constitué des sous mécanismes du n-décane, du n-dodécane et de l'iso-octane. La composition des deux carburants modèles a été déterminée par le logiciel de calcul Surrogate Blend Optimizer SBO. Pour simuler le kérosène issu de la biomasse R-8, ils ont utilisé le carburant modèle du S-8.

Le mécanisme a été élaboré en fusionnant les mécanismes de haute température des alcanes développés par Westbrook *et al* [83] (tout en gardant le sous mécanisme de basse et haute température C_0-C_2 (C_0 représente H_2) et celui de l'iso-octane proposé par Curran *et al* [103]. Le modèle est composé de 564 espèces et 3556 réactions. Dans le but de prévoir les émissions des oxydes d'azotes et de particules de suies, Naik *et al* ont rajouté un sous-mécanisme des NO_x comportant 33 espèces et 298 réactions [104, 105]. Le modèle intègre aussi un sous-mécanisme d'oxydation des HAP, précurseurs des suies [106-108] composé de 156 espèces et 814 réactions. Le mécanisme final pour la simulation des carburéacteurs reformulé de substitutions (S-8, Shell GTL, R-8) comporte 753 espèces et 4668 réactions. Le mécanisme a été validé dans différentes configurations expérimentales. Les résultats obtenus en tube à choc par Davidson *et al* [109] et Vermeer *et al* [110] pour l'oxydation de l'iso-octane sont en accord avec les résultats simulés. Les délais d'auto-inflammation simulés reproduisent correctement les profils expérimentaux obtenus par Pfahl *et al* [45] pour l'oxydation du n-décane et par Vasu *et al* [16] pour l'oxydation du n-dodécane. Les températures d'auto-inflammations mesurées en brûleur par Bieleveld *et al* [111] avec l'iso-octane sont aussi bien modélisées au moyen de ce mécanisme. Le mécanisme reproduit de manière satisfaisante les vitesses de flammes laminaires du n-décane et du n-dodecane obtenus par Kumar et Sung [53] et Ji *et al* [54, 88]. De bons accords ont aussi été obtenus entre les profils simulés et les vitesses de flammes laminaires expérimentales de l'iso-octane

mesurés par Davis et Law [112] et Huang et Sung [113]. Pour finir le mécanisme a été validé en flamme (vitesse de flamme et étirement à l'extinction) en utilisant les données expérimentales de Ji *et al* [99] pour l'oxydation des kérosènes de synthèse S-8, Shell GTL et du R-8. Comme l'illustre la figure ci-dessous, le modèle reproduit parfaitement les résultats expérimentaux.

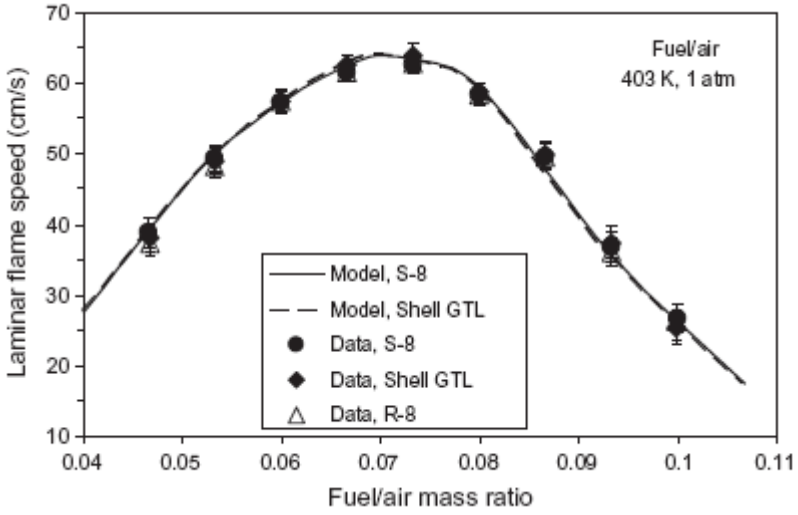


Figure II.14: Comparaisons des vitesses de flammes laminaires mesurées et simulées à T = 403 K et P = 1 atm [102]

Naik *et al* ont aussi modélisé les émissions de NO_x issues de la combustion des trois kérosènes reformulés (S-8, Shell GTL et R-8). Ils obtiennent un bon accord entre les résultats de simulations et les profils expérimentaux.

Pour leurs modélisations, Sarathy *et al* [96] ont élaboré un modèle cinétique d'oxydation comprenant 3401 réactions et 714 espèces. Il regroupe le mécanisme de Westbrook *et al* [83] conçu pour la simulation des alcanes, celui de Mehl *et al* [114, 115] pour l'iso-octane ainsi que les réactions de hautes températures du 2-méthylhexane [116] et du 2-méthylheptane [117]. Les résultats simulés sont en accord avec les expériences. Le mécanisme cinétique a été validé en machine à compression rapide, en réacteur auto-agité, en tube à choc et en flammes [118].

Le carburéacteur synthétique utilisé lors des expériences de Gokulakrishnan *et al* [97] est composé d'un mélange volumique d'iso-paraffines (80%) et de paraffines (20%). Pour simuler leurs résultats (JP-8 et du S-8) Gokulakrishnan *et al* ont développé un mécanisme cinétique chimique de haute température comportant 700 espèces et 2000 réactions incluant les réactions du n-décane, n-propylbenzène, n-propylcyclohexane, du décène et de l'iso-

octane. Leurs analyses de sensibilité montrent le faible impact des iso-paraffines sur les délais d'auto-inflammation dans les zones de hautes températures. Par contre la présence d'iso-paraffines peut avoir un effet sur les délais d'auto-inflammation (augmentation) des carburéacteurs de synthèse dans la zone de coefficient négatif de température CNT comprise entre 700 et 900 K.

2.5 Conclusion

Ce chapitre a présenté les différents travaux expérimentaux et numériques réalisés antérieurement sur l'oxydation de kérosènes conventionnels, de certains hydrocarbures lourds et des carburants reformulés destinés au secteur aéronautique.

Les travaux effectués sur les kérosènes conventionnels et les hydrocarbures lourds (n-décane, n-dodécane et n-tetradécane) sont nombreux. Les mécanismes cinétiques élaborés pour l'oxydation de ces carburants ont été validés par différents dispositifs expérimentaux (réacteur auto-agité, tube à choc et brûleur) et dans différentes conditions expérimentales.

Pour faire face aux menaces sur les ressources pétrolières et aux problèmes environnementaux causés par les énergies fossiles, les recherches sur les carburéacteurs synthétiques ont augmenté au cours de ces dernières années. Cependant la cinétique d'oxydation des carburéacteurs de synthèses est moins connue. En effet, on recense très peu de modèles cinétiques conçus pour simuler la combustion de ces carburants alternatifs couvrant le domaine de la flamme froide et les hautes températures. Nos travaux viseront à combler ces lacunes.

Références bibliographiques

[1] J. M. Simmie

Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbons fuels, Progress in Energy and Combustion Sciences, 2003, vol. 29, pp. 599-634

[2] J. Zador, C. A. Taatjes and R. X. Fernandes

Kinetics of elementary reactions in low-temperature autoignition chemistry, Progress in Energy and Combustion Science, 2011, vol. 37, pp. 371-421

[3] B. P. Mullins

Studies on the spontaneous Ignition of Fuels injected into a hot air stream III-effect of chemical factors upon the ignition delay of kerosene-air mixture, Fuel, 1953, vol. 32, pp. 327-342

[4] A. Mestre and F. Ducourneau

Recent studies on the spontaneous ignition of rich air-kerosene mixtures, European Symposium on Combustion, ED. Weinberg F. J, 1973

[5] L. J. Spadaccini and J. A. TeVelde

Autoignition Characteristics of Aircraft-Type Fuels, Combustion and Flame, 1982, vol. 46, pp. 283-300

[6] G. Freeman and A. H. Lefebvre

Spontaneous Ignition Characteristics of Gaseous Hydrocarbon-Air Mixtures, Combustion and Flame, 1984, vol. 58, pp. 153-162

[7] C. Guéret

Elaboration d'un modèle cinétique pour l'oxydation du kérosène et d'hydrocarbures représentatifs, Thèse, Université d'Orléans, 1989

[8] C. Guéret

Experimental study and modeling of kerosene oxidation in JSR, 23rd Symposium International on Combustion, Pittsburgh, 1990

[9] P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3.n-decane, Combustion science and technology, 1994, vol. 103, pp. 349-359

[10] P. Dagaut, M. Reuillon, J-C. Boettner and M. Cathonnet

Kerosene combustion at pressures up to 40 atm: Experimental study and detailed chemical kinetic modelling, 24th Symposium International on Combustion, 1994, pp. 919-926

[11] P. Dagaut, M. Reuillon, M. Cathonnet and D. Voisin

High pressure oxidation of normal decane and kerosene in dilute conditions from low to high temperature , Journal of Chemical Physics, 1995, vol. 92, pp. 47-76
pp. 919-926

[12] P. Dagaut

On the kinetic of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp. 2079-2094

[13] P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[14] M. Cathonnet, D. Voisin, A. Etsordi, C. Sferdean, M. Reuillon, J.C. Boettner and P. Dagaut

Kerosene combustion modeling using detailed and reduced chemical kinetic mechanisms, The RTO AVT Symposium on "Gas Turbine Engine Combustion, Emissions and Alternative Fuels" Paper No 14, 1998, Lisbon

[15] S. S. Vasu, D. F. Davidson and R. K. Hanson

Jet fuel ignition delay times: Shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions, Combustion and Flame, 2008, vol. 152, pp. 125-143

[16] S. S. Vasu, D. F. Davidson, Z. Hong, V. Vasudevan and R. K. Hanson

n-Dodecane oxidation at high-pressures: Measurements of ignition delay times and OH concentration time-histories, Proceedings on the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 173-180

[17] A. J. Dean, O. G. Penyazkov, K. L. Sevruk and B. Varatharajan

Ignition of aviation kerosene at high temperatures, 20th ICDERS, Montréal, 21-5 July-August 2005, Canada

[18] P. Gokulakrishnan, G. Gaines, J. Currano, M. S. Klassen and R. J. Roby

Experimental and kinetic modelling of kerosene-type fuels at gas turbine operating conditions, Journal of Engineering fo Gas Turbines and Power, 2007, vol. 129, pp. 656-663

[19] C. Douté, J-L. Delfau, R. Akrich and C. Vovelle

Chemical Structure of atmospheric Pressure Premixed n-Decane and Kerosene Flames, Combustion Science and Technology, 1995, vol. 106, pp. 327-344

[20] C. Vovelle, J-L. Delfau, M. Reuillon, R. Akrich, M. Bouhria and O. Sanogo

Comparison of aromatics formation in decane and kerosene flames, Proceedings ACS National Meeting, 1991, New York, 36, pp. 1456-1463

[21] K. Kumar, C-J. Sung and X. Hui

Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels, Fuel, 2010, vol. 90, pp. 1004-1011

[22] J. A. Cooke, M. Bellucci, M. D. Smooke, A. Gomez, A. Violi, T. Faravelli and E. Ranzi

Computational and experimental study of JP-8, a surrogate, and its components in counterflow diffusion flames, Proceedings of the Combustion Institute, 2005, vol. 30, pp. 439–446

[23] S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann and N. Peters

A surrogate fuel for kerosene, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 485-492

[24] C. Eigenbrod, O. Moriue, P. Weilmunster and H. J. Rath

Development of a Simple Model Fuel for kerosene Droplet Ignition, 28th International Annual Conference of Fraunhofer Institut Chemische Technologie, 1997, Karlsruhe, Germany, pp. 42.1–42.14

[25] A. T. Holley, Y. Dong, M. G. Andac, F. N. Egolfopoulos and T. Edwards

Ignition and extinction of non-premixed flames of single-component liquid hydrocarbons, jet fuels, and their surrogates, Proceedings of the Combustion Institute 2007, vol. 31, pp. 1205-1213

[26] A. Chakir, M. Belliman, J. C Boettner and M. Cathonnet

Kinetic Study of n-Pentane Oxidation, Combustion Science and Technology, 1991, vol. 77, pp. 239-260

[27] D. Voisin

Cinétique chimique d'oxydation d'hydrocarbures et obtention d'un modèle pour la combustion du kérosène, Thèse, Université d'Orléans, 1997

[28] R. P. Lindstedt and L. Q. Maurice

Detailed chemical kinetic model for aviation fuels, Journal of Propulsion and Power, 2000, vol. 16, pp. 187–195

[29] P. M. Patterson, A.G. Kyne, M. Pourkashanian, A. Williams and C. W. Wilson

Combustion of kerosene in counterflow diffusion flames, Journal of Propulsion and Power, 2000, vol. 16, pp. 453-460

[30] A. Violi, S. Yan, E. G. Eddings, A. F. Sarofim, S. Granata, T. Faravelli and E. Ranzi

Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures, Combustion Science and Technology, 2002, vol. 174, pp. 399-417

[31] C. J. Montgomery, S. M. Cannon, M. A. Mawid and B. Sekar

Reduced Chemical Kinetic Mechanisms for JP-8 Combustion, 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, Paper 2002-0336, 14-17 January 2002, Reno, Nevada

[32] J. Luche, M. Reuillon, J-C. Boettner and M. Cathonnet

Reduction of a Large Detailed Kinetic Mechanisms: Application to Kerosene/Air combustion, Combustion Science and Technology, 2004, vol. 176, pp. 1935-1963

[33] H. Wang, E. Dames, B. Sirjean, D. A. Sheen, R. Tangko, A. Violi , J. Y. W. Lai, F. N. Egolfopoulos, D. F. Davidson, R. K. Hanson, C. T. Bowman, C. K. Law, W. Tsang, N. P. Cernansky, D. L. Miller and R. P. Lindstedt

A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures, JetSurF version 2.0, September 19, 2010, (http://melchior.usc.edu/JetSurF/JetSurF2.0)

[34] G. Bikas and N. Peters

Kinetic Modeling of n-Decane Combustion and Autoignition, Combustion and Flame, 2001, vol. 126, pp. 1456-1475

[35] G. Bikas

Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon Ignition, Thesis, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 2001

[36] C. P. Wood, V. G. McDonell, R. A. Smith and G. S. Samuelsen

Development and Application of a Surrogate Distillate Fuel, Journal of Propulsion and Power, 1989, vol. 5, pp. 399-405

[37] W. D. Schulz

Prepr. Pap.-American Chemical. Society, Div. Pet. Chem. 1991, vol. 37, pp. 383–392

[38] C. F. Cullis, M. M. Hirschler and R. L. Rogers

The oxidation of decane in the liquid and gaseous phases, Proceedings of the Royal Society A, 1981, vol. 375, pp. 543-563

[39] C. F. Cullis, M. M. Hirschler and R. L. Rogers

Experimental techniques for the combustion of fuels of low volatility and high reactivity, 18th Symposium International on Combustion, The combustion Institute, 1981, pp. 1575-1582

[40] C. F. Cullis, M. M. Hirschler and R. L. Rogers

The cool-flame combustion of decane, Proceedings of the Royal Society A, 1982, vol. 382, pp. 429-440

[41] C. Balès-Guéret, M. Cathonnet and J-C. Boettner

Experimental study and kinetic modeling of higher hydrocarbons oxidation in a jet-stirred flow reactor, Energy and Fuels, 1992, vol. 6, pp. 189-194

[42] J. Biet, M. H. Hakka, V. Warth, P-A. Glaude and F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the low-temperature oxidation of large alkanes, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 2258-2269

[43] S. P. Zeppieri, S. D. Klotz and L. Dryer

Modeling concepts for larger carbon number alkanes: a partially reduced skeletal mechanism for n-decane oxidation and pyrolysis, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1587-1595

[44] K. Kumar

Global combustion responses of practical hydrocarbon fuels: n-heptane, iso-octane, n-decane, n-dodecane and ethylene, Thesis, Case Western Reserve University, 2007

[45] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit

Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 1996, vol. 26, pp. 781-789

[46] V. P. Zhukov, V. A. Sechenov and A. Y. Starikovskii

Autoignition of n-decane at high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 153, pp. 130-136

[47] H-P. S. Shen, J. Steinberg, J. Vanderover and M. A. Oehlschlaeger

A shock tube study of the ignition of n-heptane, n-decane, n-dodecane and n-tetradecane at elevated pressures, Energy and Fuels, 2009, vol. 23, pp. 2482-2489

[48] D. C. Horning, D. F. Davidson and R. K. Hanson

Study of the high- temperature auto-ignition of n-alkane/O_2/Ar mixtures, Journal of the Propulsion and Power, 2002, vol. 18, pp. 363-371

[49] D. F. Davidson, J. T. Herbon, D. C. Horning and R. K. Hanson

OH concentration time histories in n-alkane oxidation, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol. 33, pp. 775-783

[50] M. S. Skjøth-Rasmussen, M. Braun-Unkhoff, C. Naumann and P. Frank

Experimental and numerical study of n-decane chemistry, Proceedings of the European Combustion Meeting, 2003

[51] P. Wagner and G. L. Dugger

Flame propagation V. Structural influences on burning velocity-Comparison of measured and calculated burning velocities, Journal of the American Chemical Society, 1995, vol. 77, pp. 227-231

[52] Z. Zhao, J. LI, A. Kazakov, F. L. Dryer and S. P. Zeppieri

Burning velocities and a high temperature skeletal kinetic model for n-decane, Combustion Science and Technology, 2005, vol. 177, pp. 89-106

[53] K. Kumar and C-J. Sung

Laminar flame speeds and extinction limits of preheated n-decane/O_2/N_2 and n-dodecane/O_2/N_2 mixtures, Combustion and Flame, 2007, vol. 151, pp. 209-224

[54] C. Ji, E. Dames, Y. L. Wang, H. Wang and F. N. Egolfopoulos

Propagation and extinction of premixed C_5 –C_{12} n-alkane flames, Combustion and Flame, 2010, vol. 157, pp. 277-287

[55] J-L. Delfau, M. Bouhria, M. Reuillon, O. Sanogo, R. Akrich and C. Vovelle

Experimental and computational investigations of the structure of a sooting decane-O_2-Ar flame, Proceedings of The Combustion Institute, 1990, vol. 23, pp. 1567-1572

[56] X. You, F. N. Egolfopoulos and H. Wang,

Detailed and simplified kinetic models of n-dodecane oxidation: The role of fuel cracking in aliphatic hydrocarbon combustion, Proceedings of The Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 403-410

[57] M. Colket, T. Edwards, S. Williams, N. P. Cernansky, D. L. Miller, F. Egolfopoulos, R. P. Lindstedt, K. Seshadri, F. L. Dryer, C. K. Law, D. Friend, D. B. Lenhert, H. Pitsch, A. Sarofim, M. Smooke and W. Tsang

Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Jet Fuels, 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2007, Paper 2007-770, Nevada

[58] S. Humer, A. Frassoldati, S. Granata, T. Faravelli, E. Ranzi, R. Seiser and K. Seshadri

Experimental and kinetic modeling study of combustion of JP-8, its surrogates and reference components in laminar nonpremixed flows, Proceedings of The Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 393-400

[59] T. Edwards and L. Q. Maurice

Surrogate Mixtures to Represent Complex Aviation and Rocket Fuels, Journal of Propulsion and Power, 2001, vol. 17, pp. 461-466

[60] H. Huang, D. R. Sobel and L. J. Spadaccini

Endothermic heat-sink of hydrocarbon fuels for scramjet cooling, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2002, Paper 2002-3871

[61] A. Agosta, N. P. Cernansky, D. L. Miller, T. Faravelli and E. Ranzi

Reference components of jet fuels: kinetic modeling and experimental results, Experimental Thermal and Fluid Science, 2004, vol. 28, pp. 701–708

[62] O. Herbinet, P-M. Marquaire, F. Battin-Leclerc and R. Fournet

Thermal decomposition of n-dodecane: Experiments and kinetic modelling, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2007, vol. 78, pp. 419–429

[63] D. B. Lenhert, N. P. Cernansky and D. L. Miller

Oxidation of a Large Molecular Weight Hydrocarbons in a Pressurized Flow Reactor, Proceedings of the 4th Joint Meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute, 2005, Philadelphia, PA, pp. 1-6

[64] N. Blin-Simiand, F. Jorand, K. Sahetchian, M. Brun, L. Kerhoas, C. Malosse and J. Einhorn

Hydroperoxides with zero, one, two or more carbonyl groups formed during the oxidation of n-dodecane, Combustion and Flame, 2006, vol. 126, pp. 1524-1532

[65] D. F. Davidson, D. R. Haylett and R. K. Hanson

Development of an aerosol shock tube for kinetic studies of low-vapor-pressure fuels, Combustion and Flame, 2008, vol. 155, pp. 108-117

[66] D. F. Davidson, Z. Hong, G. L. Pilla, A. Farooq, R. D. Cook and R. K. Hanson

Multi-species time-history measurements during n-dodecane oxidation behind reflected shock waves, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 151–157

[67] D. Segawa, T. Kadota, R. Kohama and H. Enomoto

Ignition of binary mixture droplets by a propagating laminar flame, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 961–968

[68] A. T. Holley, Y. Dong, M. G. Andac, F. N. Egolfopoulos and T. Edwars

Proc. of the 2005 Fall Meeting, WSS/CI, 2005, Paper 05F-56, Stanford, CA,

[69] D. M. A. Karwat, S. W. Wagnon, J. Y. W. Lai, M. S. Wooldridge and C. K. Westbrook

An Experimental and Computational Investigation of n-Dodecane Ignition and Chemical Kinetics, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, 2011, Paper 2011-90, Orlando, Florida

[70] M. L. Huber, B. L. Smith, L. S. Ott, and T. J. Bruno

Surrogate Mixture Model for the Thermophysical Properties of Synthetic Aviation Fuel S-8: Explicit Application of the Advanced Distillation Curve, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 1104-1114

[71] M. L. Huber, E. W. Lemmon and T. J. Bruno

Surrogate Mixture Models for the Thermophysical Properties of Aviation Fuel Jet-A, Energy and Fuels, 2010, vol. 24, pp. 3565-3571

[72] A. Cavaliere, A. Ciajolo A. D'Anna, R. Mercogliano and R. Ragucci

Autoignition of n-heptane and n-tetradecane in engine-like conditions, Combustion and Flames, 1993, vol. 93, pp. 279-286

[73] A. Ciajolo, A. D'Anna, R. Barbella and C. Bertoli

Combustion of Tetradecane and Tetradecane/ α-Methylnaphthalene in a Diesel Engine with Regard to Soot and PAH Formation, Combustion Science and Technology, 1992, vol. 87, pp. 127-137

[74] C. Chevalier, W. J. Pitz, J. Warnatz, C. K. Westbrook and H. Melenk

Hydrocarbon ignition: Automatic generation of reaction mechanisms and applications to modeling of engine knock, 24th Symposium International on Combustion, 1992, vol. 24, pp. 93-101

[75] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit

Shock Tube Investigation of Ignition Delay Times of Multicomponent Fuel/Air-Mixtures under Engine Relevant Conditions, Final Report, Subprogramme FK.4, IDEA-EFFECT, 1996

[76] J. Warnatz

HOMREA User Guide Version 2.5, 2002,
http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/reaflow/Descr.HOMREA.pdf

[77] F. Battin-Leclerc, R. Fournet, P. A. Glaude, B. Judenherc, V. Warth, G. M. Côme and G. Scacchi

Modeling of the gas- phase oxidation of n-decane from 550 to 1600 K, Proceedings of the Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 1597-1605

[78] F. Buda, R. Bounaceur, V. Warth, P. A. Glaude, R. Fournet and F. Battin-Leclerc

Progress toward a unifed detailed kinetic model for the autoignition of alkanes from C_4 to C_{10} between 600 and 1200 K, Combustion and Flame, 2005, vol. 142, pp. 170-186

[79] C. Douté, J. L. Delfau and C. Vovelle

Modeling of the structure of a premixed n-decane flame, Combustion Science and Technology, 1997, vol. 130, pp. 269-313

[80] D. Bradley, S. El-Din Habik and S. A. El-Sherif

A generalization of laminar burning velocities and volumetric heat release rates, Combustion and Flame, 1991, vol. 87, pp. 336-346

[81] E. Ranzi, M. Dente, A. Goldaniga, G. Bozzano and T. Faravelli

Lumping procedures in detailed kinetic modeling of gasification, pyrolysis, partial oxidation and combustion of hydrocarbon mixtures, Progress in Energy and Combustion Science, 2001, vol. 27, pp. 99-139

[82] E. Ranzi, A. Frassoldati, S. Granata and T. Faravelli

Wide-Range kinetic modeling study of the pyrolysis, partial oxidation, and combustion of heavy n-alkanes, Industrial and Engineering Chemistry Research, 2005, vol. 44, 5170-5183

[83] C. K. Westbrook

A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane, Combustion and Flame, vol. 156, pp. 181-199

[84] B. Sirjean, E. Dames, D. A. Sheen, X.-Q. You, C. Sung, A. T. Holley, F. N. Egolfopoulos, H. Wang, S. S. Vasu, D. F. Davidson, R. K. Hanson, H. Pitsch, C. T. Bowman, A. Kelley, C. K. Law, W. Tsang, N. P. Cernansky, D. L. Miller, A. Violi and R. P. Lindstedt

A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane oxidation, JetSurF version 0.2, September 8, 2008 (http://melchior.usc.edu/JetSurF/Version0_2/Index.html)

[85] H. Zhang

The Utah Surrogate Mechanism, the Department of Chemical Engineering, the University of Utah, 2005

[86] X. You, F. N. Egolfopoulos and H. Wang

Detailed and simplified kinetic models of n-dodecane oxidation: The role of fuel cracking in aliphatic hydrocarbon combustion, Proceedings of the Combustion Institute 2009, vol. 32, pp. 403–410

[87] K. D. Dahm, P. S. Virk, R. Bounaceur, F. Battin-Leclerc, P. M. Marquaire, R. Fournet, E. Daniau and M. Bouchez

Experimental and modelling investigation of the thermal decomposition of n-dodecane, Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2004, vol. 71, pp. 865-881

[88] C. Ji, X. Q. You, A. T. Holley, Y. L. Wang, F. N. Egolfopoulos and H. Wang

Propagation and Extinction of n-Dodecane/Air Flames: Experiments and Modeling, Poster paper presented at the 32nd International Symposium on Combustion, 2007, Montreal, Canada

[89] P. Dagaut and S. Gail

Chemical kinetic study of the effect of a biofuel additive on Jet A-1 combustion, The Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3992-4000

[90] E. Corporan, M. J. DeWitt, V. Belovich, R. Pawlik, A. C. Lynch, J. R. Gord, and T. R. Meyer

Emissions characteristics of a turbine engine and research combustor burning a Fischer-Tropsch Jet Fuel, Energy and Fuels, 2007, vol. 21, pp. 2615-2626

[91] R. H. Clark and J. F. Unsworth

Proceedings of the 2nd International Colloquium on Fuels, Tech. Akad. Esslingen, 20-21 January 1999, Ostfildern, Germany

[92] T. P. Gardner, S. S. Low and T. E. Kenney

Evaluation of some alternative diesel fuels for low emissions and improved fuel economy, SAE Technical, 2001, Paper 2001-01-0149

[93] D. Schmidt, V. W. Wong, W. H. Green, M. A. Weiss and J. B. Heywood

Review and Assessment of Fuel Effects and Research Needs in Clean Diesel Technology Proceedings of ASME-ICED Spring Technical Conference, 29-2 April-May 2001, vol. 36, pp. 23-37

[94] T. L. Alleman, R. L. McCormick and K. Vertin

Assessment of criteria pollutant emissions from liquid fuels derived from natural gas, Report NREL/TP-540-31873, 2002, National Renewable Energy Laboratories, Golden, CO

[95] M. S. P. Kahandalawa, M. J. Dewitt, E. Corporan and S. S. Sidhu

Ignition and Emission Characteristics of Surrogate and Practical Jet Fuels, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3673-3679

[96] S. M. Sarathy, C. Yeung, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, M. Mehl and M. J. Thomson

An experimental and kinetic modeling study of n-octane and 2-methylheptane in an opposed-flow diffusion flame, Combustion and Flames, 2011, vol. 158, pp. 1277-1287

[97] P. Gokulakrishnan, M. S. Klassen and R. J. Roby

Ignition Characteristics of a Fischer-Tropsch Synthetic Jet Fuel, Proceedings of ASME Turbo Expo, 2008, vol. 3, Pts A and B, pp. 921-929

[98] K. Kumar and C-J. Sung

A comparative experimental study of the auto-ignition characteristics of alternative and conventional jet fuel/oxidizer mixtures, Fuel, 2010, vol. 89, pp. 2853-2863

[99] C. Ji, Y.L. Wang and F. N. Egolfopoulos

Journal of Propulsion and Power, 2011, vol. 27, pp. 856-863.

[100] A. Ristori, P. Dagaut and M. Cathonnet.

The oxidation of n-hexadecane: experimental and detailed kinetic modeling, Combustion and Flame, 2001, vol. 125, pp. 1128-1137

[101] P. Dagaut, S.Gail and M. Sahasrabudhe

Rapeseed oil methyl ester oxidation over extended ranges of pressure, temperature, and equivalence ratio: Experimental and modeling kinetic study, Proceedings of the Combustion Institute, 2007, vol. 31, pp. 2955-2961

[102] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng and T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[103] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook

A comprehensive modelling study of iso-octane oxidation, Combustion and Flame, 2002, vol. 129, pp. 253-280

[104] P. Dagaut, P. Glarborg and M. U. Alzueta

The oxidation of hydrogen cyanide and related chemistry, Progress in Energy and Combustion Science, 2008, vol. 34, pp. 1-46

[105] C. L. Rasmussen, A. E. Rasmussen and P. Glarborg

Sensitizing effects of NO_x on CH_4 oxidation at high pressure, Combustion and Flame, 2008, vol. 154, pp. 529-545

[106] J. Appel, H. Bockhorn and M. Frenklach

Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C_2 hydrocarbons, Combustion and Flame, 2000, vol. 121, pp. 122-136

[107] M. S. Skjøth-Rasmussen, P. Glarborg, M. Østberg, J. T. Johannessen, H. Livbjerg A. D. Jensen and T. S. Christensen

Formation of polycyclic aromatic hydrocarbons and soot in fuel-rich oxidation of methane in a laminar flow reactor, Combustion and Flame, 2004, vol. 136, pp. 91-128

[108] H. R. Zhang, E. G. Eddings, A. F. Sarofim and C. K. Westbrook

Fuel dependence of benzene pathways, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 377-385

[109] D. F. Davidson, M. A. Oehlschlaeger, J. T. Herbon and R. K. Hanson

Shock tube measurements of iso-octane ignition times OH concentration time histories, Proceedings of the Combustion Institute, 2002, vol. 29, pp. 1295-1301

[110] D. J. Vermeer, J. W. Meyer and A. K. Oppenheim

Auto-ignition of hydrocarbons behind reflected shock waves, Combustion and Flame, 1972, vol. 18, pp. 327-336

[111] T. Bieleveld, A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, E. Ranzi, U. Niemann and K. Seshadri

Experimental and kinetic modelling study of combustion of gasoline, its surrogate and components in laminar non-premixed flows, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 493-500

[112] S. G. Davis and C. K. Law

Laminar flame speeds and oxidation kinetics of iso-octane-air and n-heptane-air Flames, Proceedings of the Combustion Institute, 1998, vol. 27, pp. 521-527

[113] Y. Huang, C. J. Sung and J. A. Eng

Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures, Combustion and Flame, 2004, vol. 139, pp. 239-251

[114] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook and H. J. Curran

Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 193-200

[115] M. Mehl, W. J. Pitz, M. Sjöberg and J. E. Dec

Detailed kinetic modeling of low-temperature heat release for PRF fuels in an HCCI engine, International Powertrains, Fuels and Lubricants Meeting, 2009, SAE Paper 2009-01-1806, Florence, Italy

[116] C. K. Westbrook, W.J. Pitz, H.J. Curran, J. Boercker and E. Kunrath

Chemical kinetic modeling study of shock tube ignition of heptane isomers, International Journal of Chemical Kinetics, 2001, vol. 33, pp. 868–877

[117] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook

A comprehensive modelling study of n-heptane oxidation, Combustion and Flame, 1998, vol. 114, pp. 149-177

[118] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz, C. Togbe, P. Dagaut , H. Wang M.A. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P.S. Veloo, C. Ji, F. Egolfopoulos, T. Lu.

Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of C_8 and larger n-alkanes and 2-methylalkanes, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 2338-2357

CHAPITRE 3 :

DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL

3 Dispositif expérimental 99

3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) 100

3.1.1 Principe du réacteur auto-agité 100

3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux 100

3.1.3 Calculs des débits gazeux 103

3.1.4 Prélèvements des gaz de combustion 104

3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion 105

3.2.1 Analyse par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier 106

3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse 108

3.3 Incertitudes sur les résultats 111

3.4 Conclusion 112

Références bibliographiques 113

3 Dispositif expérimental

Ils existent plusieurs dispositifs expérimentaux pour étudier l'oxydation des hydrocarbures. On distingue les brûleurs tels que les brûleurs à flamme plate ou à contre courant, les systèmes à compression tels que les machines à compression rapide ou les tubes à choc et les réacteurs tels que les réacteurs fermés, à écoulement tubulaire ou parfaitement agité. Chaque dispositif a ses propres caractéristiques, avantages, inconvénients et limitations. Le dispositif expérimental utilisé dans ce travail de thèse est le réacteur auto-agité par jets gazeux (Jet-Stirred Reactor). Il a pour particularité de permettre de travailler dans un large domaine de température (jusqu'à 1500 K), de richesse (0-∞), de temps de passage, et d'être pressurisable (jusqu'à 40 atm), de permettre la mesure de la concentration des réactifs, intermédiaires stables et produits de combustion. Enfin il peut être assimilé à un réacteur idéal, ce qui permet de concentrer les efforts sur la cinétique chimique des systèmes étudiés.

3.1 Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR)

3.1.1 Principe du réacteur auto-agité

Comme indiqué en préambule, le réacteur auto-agité par jets gazeux permet d'étudier la cinétique d'oxydation d'un grand nombre hydrocarbures dans un large domaine de température, de pression, de richesse et de temps de passage.

Un réacteur parfaitement agité est caractérisé par une composition totalement homogène à tout instant et dans tout le volume réactionnel c'est-à-dire dans l'ensemble du réacteur. Cette condition est remplie lorsque le temps de mélange des réactifs et le temps mis par une molécule pour aller d'un point quelconque du réacteur à un autre sont infiniment faibles devant le temps de passage. Il en résulte que les produits de combustion prélevés en sortie du réacteur ont une composition identique à celle du mélange réactionnel. Les réactions qui se déroulent dans le milieu réactionnel sont donc contrôlées par les processus chimiques. Le temps de passage τ est donné par l'équation suivante :

$$\tau = \frac{V_r}{D_e}$$

avec D_e débit volumique [$cm^3.s^{-1}$]

V_r volume du réacteur [cm^3]

Il faut noter que dans ces conditions, le temps de séjour moyen ($\bar{t}_s$) des gaz de réactions est équivalent au temps de passage τ.

3.1.2 Description du réacteur auto-agité par jets gazeux

Le dispositif expérimental utilisé lors de ces travaux de thèse est un réacteur auto-agité par jets gazeux aussi appelé Jet Stirred Reactor pouvant atteindre une température maximale avoisinant les 1500 K et une pression maximale de 40 atm.

Le réacteur a été mis au point par Dagaut *et al.* [1] en 1986 au CNRS-LCSR (Centre de Recherches sur la Chimie de la Combustion et des Hautes Températures) à Orléans. Il est inspiré des travaux de Matras, David et Villermaux [2, 3].

Ce dispositif permet d'étudier les mécanismes d'oxydation des hydrocarbures. Les expériences présentées ici ont été menées à pression et temps de passage constants, et à différentes richesses.

Le réacteur est une sphère en silice fondue (quartz), pour limiter les réactions catalytiques aux parois, d'un volume de 33 cm^3. Le mélange gazeux est introduit dans le réacteur à l'aide de quatre injecteurs (1 mm de diamètre intérieur). Les injecteurs sont opposés deux à deux dans le but de rendre le mélange gazeux plus homogène. C'est la turbulence des jets qui assure l'homogénéité en composition et en température des gaz présents dans le réacteur. Deux éléments chauffant isolés entourent le réacteur et permettent de chauffer la zone réactionnelle à la température souhaitée. Le réacteur est isolé thermiquement à l'aide d'une laine minérale isolante (Kerlane). Le tout est contenu dans une enceinte pressurisable en acier inoxydable. L'équilibre entre l'intérieure et l'extérieure du réacteur s'opère grâce à un débit d'azote régulé par deux électrovannes.

Le système de prélèvement est équipé d'une sonde sonique mobile couplée à un thermocouple fin (0,1mm, Pt/Pt-Rh 10 %, gainé de quartz). La mobilité de la sonde sonique permet de faire des prélèvements et de mesurer la température du milieu réactionnel le long de l'axe vertical du réacteur. Les mesures du thermocouple permettent de vérifier l'homogénéité thermique du milieu réactionnel (gradient < 3 K/cm).



Figure III.1 : Le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR)

Dans le but de rendre le mélange réactionnel homogène en température, les réactifs gazeux sont préalablement chauffés grâce à un système de préchauffage, avant leur acheminement au sein du réacteur.

Le carburant liquide à étudier est injecté à l'aide d'une pompe HPLC fournissant un débit régulier, sans pulsation. L'hydrocarbure liquide est transporté à partir d'une ligne métallique vers l'ensemble atomiseur-vaporisateur. Un flux d'azote (<50 ppm de O_2 ; <1000 ppm de Ar ; <5 ppm de H_2) (N_2 auxiliaire, 100L/h) est utilisé afin d'atomiser et diluer l'hydrocarbure. Le brouillard formé est ensuite vaporisé dans une chambre chauffée constituant le vaporisateur. La température de la chambre doit être supérieure à la température d'ébullition du combustible étudié. Ainsi le vaporisateur permet le passage du combustible liquide en phase gazeuse. Le flux gazeux azote-hydrocarbure formé est par la suite introduit dans un capillaire de quartz chauffé jusqu'à l'entrée de la zone de mélange, en amont du réacteur. Un débit d'azote, dit principal, dilue l'oxygène (O_2 pure à 99,995 %) avant mélange avec le combustible dilué et admission dans le réacteur. L'oxygène et l'azote principal sont acheminés à l'extérieur du capillaire afin d'éviter tout contact entre le combustible et le comburant avant la zone de mélange en amont du réacteur.

Des débitmètres massiques (Brooks 8550-TR) permettent la régulation des flux d'azote et d'oxygène.

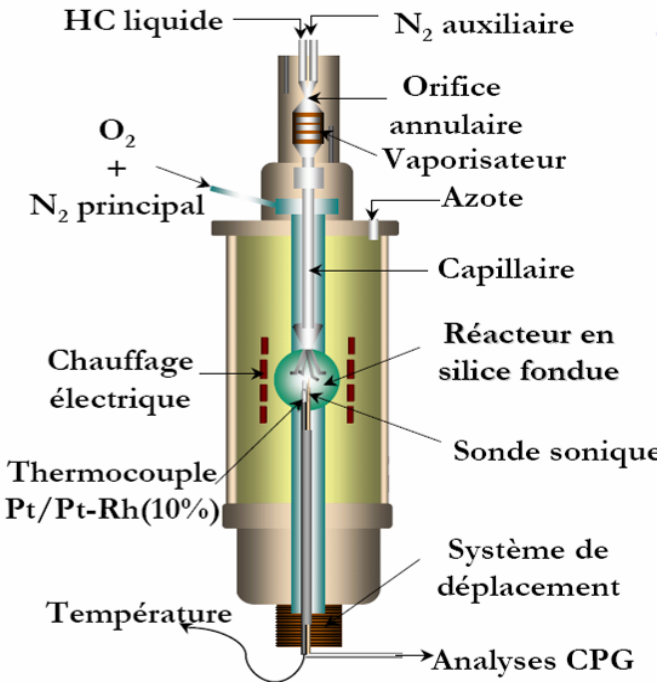


Figure III.2: Ensemble du dispositif expérimental

3.1.3 Calculs des débits gazeux

Le réacteur auto-agité permet de travailler dans différentes configurations :

- ❖ à une température constante et un temps de passage variable
- ❖ à un temps de passage constant et température variable

Les différents débits gazeux (oxygène, azote et carburant) dans le réacteur sont calculés à partir du temps de séjour moyen des gaz au sein du réacteur JSR. Ce temps de séjour moyen noté $\bar{t}_s$ aussi appelé temps de passage va rester constant tout au long de nos expériences. L'expression du temps de séjour moyen est la suivante :

$$\bar{t}_s = \left(\frac{V_r}{D_e}\right)\left(\frac{T_0}{T}\right)\left(\frac{P}{P_0}\right)$$

avec $\bar{t}_s$: temps de séjour moyen des gaz dans le réacteur [s]

D_e : débit total à l'entrée du réacteur [$cm^3.s^{-1}$]

V_r volume du réacteur [cm^3]

T température de travail [K]

T_0 température ambiante [K]

P pression de travail [atm]

P_0 pression ambiante [atm]

Le débit gazeux de chaque réactif i est noté D_i et s'exprime sous la forme suivante:

$$D_i = X_i \times D_e = X_i \left(\frac{V_r}{\bar{t}_s} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right) \left(\frac{P}{P_0} \right)$$

X_i représente la fraction molaire initiale des réactifs à l'entrée du réacteur.

Le débit de l'hydrocarbure liquide injecté dans le réacteur à l'aide de la pompe HPLC est relié au débit d'hydrocarbure gazeux par la relation suivante :

$$D_{HC(l)} = X_{HC,i} \times \left(\frac{V_r}{\bar{t}_s} \right) \left(\frac{M_{HC} \times P}{\rho_{HC} \times R \times T} \right)$$

avec M_{HC} masse molaire de l'hydrocarbure injecté [$g.mol^{-1}$]

ρ_{HC} masse volumique [$g.cm^{-3}$]

3.1.4 Prélèvements des gaz de combustion

Après avoir réglé les débits gazeux et atteint la température souhaitée du mélange réactionnel à l'aide des fours, on prélève à la sortie du réacteur un échantillon du mélange gazeux au moyen d'une sonde sonique maintenue sous vide. La différence de pression entre la sonde et l'intérieur du réacteur assure un figeage des réactions.

L'échantillon gazeux prélevé ne subit pas d'autres réactions. Ce prélèvement nous permet de procéder à une analyse en ligne de l'échantillon au moyen d'un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et d'un chromatographe en phase gazeuse.

Le prélèvement des produits de combustion dans des ballons en Pyrex de 1 L à température ambiante permet de faire une analyse différée par chromatographie en phase gazeuse.

La Figure III.3 présente l'ensemble du dispositif expérimental utilisé lors de différentes expériences.

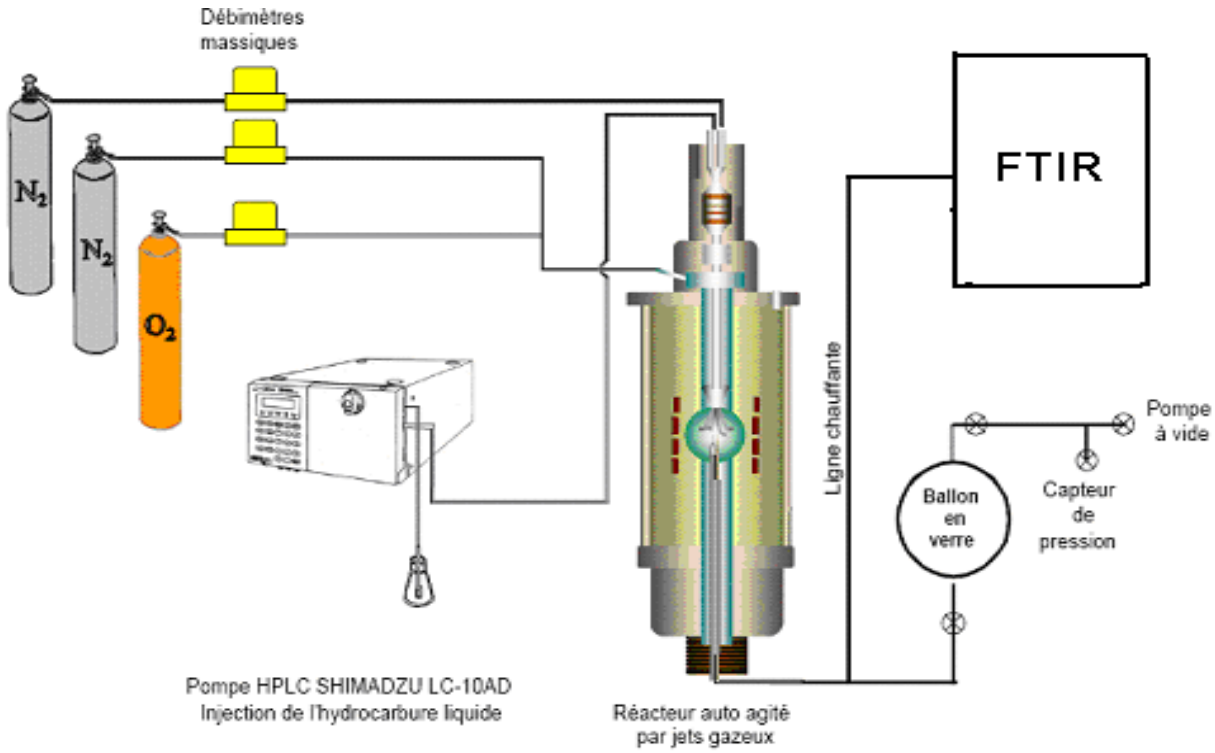


Figure III.3 : Vue d'ensemble du dispositif expérimental

3.2 Techniques d'analyse des gaz de combustion

Afin d'identifier et de quantifier les produits de combustion, nous avons utilisé un spectromètre d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et des chromatographes en phase gazeuse (CPG). Il faut dans un premier temps calibrer les instruments de détection (IRTF, CPG) utilisés par des étalonnages externes.

3.2.1 Analyse par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier

La première méthode d'analyse utilise la technique de spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier Comme nous l'avons vu précédemment le mélange gazeux est prélevé à l'aide d'une sonde sonique puis introduit dans une cellule analytique (ayant un chemin optique fixe de 2 m, 500mBar) à l'aide d'une ligne chauffé à 140 °C pour éviter toute condensation.

3.2.1.1 Principe d'un spectromètre d'absorption infrarouge à transformée de Fourier IRTF

Cette technique est basée sur l'absorption d'un rayonnement infrarouge (entre 4000 cm^{-1} et 400 cm^{-1}) par les espèces présentes dans l'échantillon à analyser. Ce domaine correspond au domaine de vibrations des molécules.

L'interféromètre de Michelson est la base du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier.

L'intensité de l'absorption dépendant de la variation du moment dipolaire, certaines espèces ne peuvent pas être détectées. En effet les molécules diatomiques symétriques de type A_2 (H_2, O_2,…) ne présentent pas de moment dipolaire et sont donc inactives en infrarouge. Par conséquent, ces molécules ne peuvent pas être identifiées par la technique IRTF. La géométrie (symétrie) de la molécule joue donc un rôle majeur.

Cette première méthode d'analyse en ligne (IRTF, Nicolet Magna 550 ; 1cm^{-1} résolution) permet d'identifier et de quantifier des espèces telles que le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, la vapeur d'eau, le formaldéhyde et quelques hydrocarbures légers tels que méthane, l'acétylène et l'éthylène.

3.2.1.2 Analyse quantitative

L'analyse quantitative est basée sur la loi de Beer-Lambert. L'absorbance A_λ est obtenue par la mesure des intensités I et I_0. L'intensité I correspond à l'intensité infrarouge à la longueur d'onde λ dans l'échantillon à analyser. L'intensité I_0 correspond à l'intensité infrarouge à la longueur d'onde λ dans le spectre du « bruit de font ». Ce spectre du bruit de fond est obtenu lorsque la cellule d'analyse est sous vide.

$$A_\lambda = -\log_{10}\left(\frac{I}{I_0}\right) = \varepsilon_\lambda \times l \times C$$

Avec ε_λ coefficient d'extinction molaire du composé à la longueur d'onde λ

l longueur du chemin optique dans l'échantillon à analyser (2 m)

C concentration du composé

Grâce à l'équation ci-dessus, la mesure expérimentale de l'absorbance à une longueur d'onde λ permet de calculer la concentration d'un composé. La détermination de plusieurs concentrations permet la réalisation d'une courbe d'étalonnage A=f(c) via des étalons pour chaque composé à analyser.

3.2.1.3 Méthode d'analyse

La méthode d'analyse de l'échantillon gazeux s'opère en plusieurs étapes : La première étape consiste à l'acquisition d'un spectre de référence pour chaque composé à analyser. On doit ensuite localiser les différentes bandes d'absorption caractéristiques de chaque composé et établir une courbe d'étalonnage à la pression et la température d'analyse. Deux composés peuvent absorber dans la même région spectrale. La dernière étape consiste donc à spécifier les interférences entre les composés.

	Espèces chimiques analysées										
	H_2O	CO_2	CO	CH_2O	MEOH	CH_4	C_2H_2	C_2H_4	C_2H_6	C_3H_6	MEHEP
A (cm^{-1})											
910.0 - 914.0	-	-	-	-	-	-	-	I	-	S	I
940.0 - 960.0	-	-	-	-	I	-	-	S	-	I	-
1030.0 - 1035.0	-	-	-	-	S	-	-	I	-	I	I
1710.0 - 1800.0	I	-	-	I	-	-	-	-	-	-	S
1741.0 - 1747.0	I	-	-	S	-	-	-	-	-	-	I
2040.0 - 2140.0	-	-	S	-	-	-	-	-	-	-	-
2350.0 - 2390.0	-	S	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2992.0 - 3001.0	-	-	-	I	I	I	-	I	S	-	-
3002. - 3019.0	-	-	-	I	I	S	-	I	I	I	I
3210.0 - 3400.0	-	-	-	-	-	I	S	I	-	-	I
3800.0 - 3875.0	S	-	-	-	I	-	-	-	-	-	-

Tableau III.1: Matrice précisant les régions d'analyse (S) des composés et leurs interférences (I)

3.2.2 Analyse par chromatographie en phase gazeuse

3.2.2.1 Principe d'un CPG

La deuxième méthode d'analyse est la chromatographie en phase gazeuse. C'est une méthode physico-chimique qui permet de séparer les différents constituants d'un mélange. Le mélange à analyser est injecté à l'entrée de la colonne (phase stationnaire) puis transporté par un gaz vecteur (phase mobile) à travers cette même colonne. Les différents constituants du mélange se séparent et sortent de la colonne en fonction de leur l'affinité avec la phase stationnaire. Le temps de rétention est défini par le temps nécessaire aux solutés pour parcourir la colonne. Il dépend des conditions de températures appliquées au chromatographe. Le passage d'étalons gazeux permet la détection des temps de rétention des composés à doser.

3.2.2.2 Analyse qualitative

Comme nous l'avons vu précédemment, l'échantillon du mélange gazeux est introduit dans des ballons en Pyrex à une pression avoisinant les 40 torrs entraînant un figeage des réactions. Cela permet de considérer que l'échantillon prélevé est bien représentatif de la composition des gaz au sein du réacteur. Ces échantillons sont par la suite analysés au moyen de différents chromatographes. Il faut noter que les échantillons sont comprimés (à 750 torrs) à l'aide d'un piston thermostaté avant toute injection dans les chromatographes. Cela a pour but d'améliorer la détection des espèces présentes dans les différents ballons lors des analyses par chromatographie en phase gazeuse.

L'oxygène et l'hydrogène sont analysés au moyen d'un chromatographe en phase gazeuse équipé d'une colonne Carboplot P7 et d'un détecteur à conductibilité thermique (TCD). La différence de conductibilité entre l'hydrogène et l'hélium est très faible. En effet pour une température de 100°C nous avons :

H_2: $54{,}3.10^5$ $cal.cm^{-1}.s^{-1}.K^{-1}$

He: $41{,}6.10^5$ $cal.cm^{-1}.s^{-1}.K^{-1}$

N_2: $7{,}5.10^5$ $cal.cm^{-1}.s^{-1}.K^{-1}$

Contrairement aux autres chromatographes utilisés dans cette étude, le gaz vecteur utilisé pour la mesure de l'hydrogène est l'azote.

Les hydrocarbures légers contenant un nombre d'atomes de carbone compris entre 1 et 6 sont analysés au moyen d'un chromatographe en phase gazeuse utilisant une colonne capillaire en alumine saturée en chlorure de potassium KCl (Plot Al_2O_3/KCl) et équipé d'un détecteur à ionisation de flamme (FID).

Un autre chromatographe équipé d'une colonne capillaire DB-624 et d'un détecteur FID, permet d'analyser une large variété hydrocarbures et de composés oxygénés. Ce même chromatographe est aussi couplé à un spectromètre de masse SM (quadripôle Varian 1200) pour affiner l'identification des composés.

Un chromatographe équipé d'une colonne DB-5ms et d'un détecteur FID permet de procéder à une analyse des produits lourds condensables. Cet appareil est directement relié à la ligne de prélèvement des gaz de réactions et permet donc de réaliser une analyse en ligne.

3.2.2.3 Analyse quantitative des espèces détectées en FID

Comme décrit précédemment, le passage d'étalons gazeux dans les appareils d'analyses permet la quantification des espèces majoritaires présente dans l'échantillon. La concentration de l'étalon X étant connue, on obtient ainsi la valeur du coefficient de réponse de l'espèce X grâce à la surface du pic chromatographique de cette même espèce. Les coefficients de réponse des composés considérés comme minoritaires sont calculés à partir des coefficients de réponse des composés ayant une structure chimique voisine ou à partir de la règle du nombre de carbone effectif (ECN). Le coefficient de réponse est spécifique à chaque espèce. La figure ci-dessous représente un exemple de droite d'étalonnage du méthane et des alcènes à 1000 ppm. L'équation de la droite est la suivante : $y = 265{,}8x$. Elle permet donc l'obtention du coefficient de réponse d'un alcène à partir de son ECN. La détermination du coefficient de réponse de l'espèce considéré va rendre possible sa quantification.

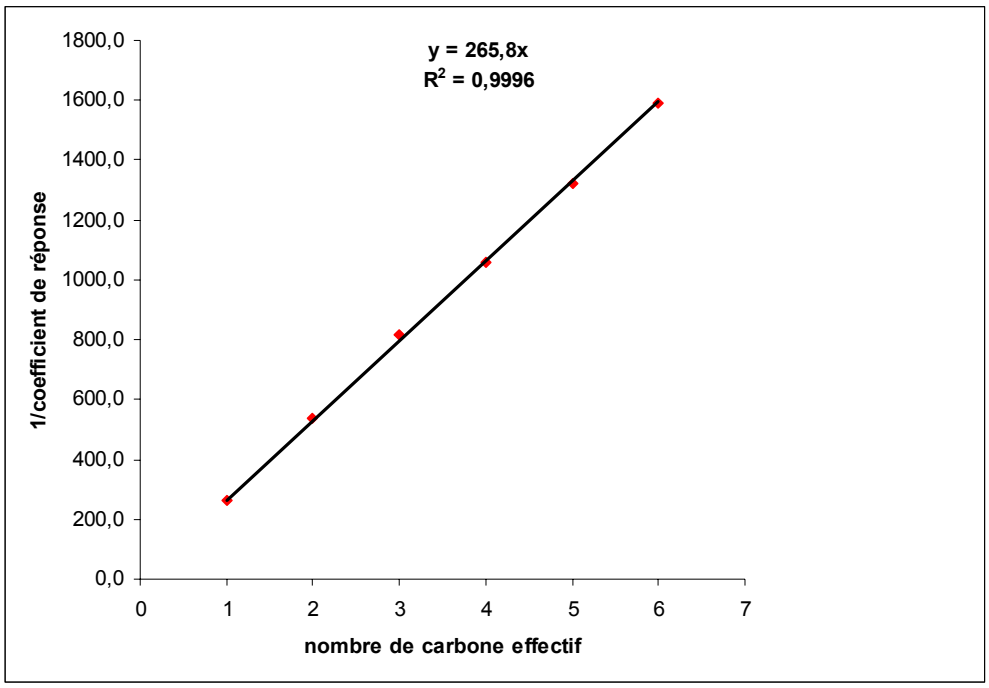


Figure III.4 : Exemple de courbe d'étalonnage des alcanes (C_1-C_6) par (CPG/DB-624)

3.3 Incertitudes sur les résultats

Il y a plusieurs sources d'incertitudes sur les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité que ce soit au niveau du dispositif expérimental ou du système analytique.

En ce qui concerne le dispositif expérimental, la température du mélange gazeux au sein du réacteur n'est pas parfaitement homogène dans tout le volume réactionnel. En effet, elle varie d'environ 5 K dans le réacteur.

Ce sont les débits gazeux (hydrocarbure, azote et oxygène) qui imposent la composition du mélange gazeux. La présence d'erreurs sur les débits des réactifs (de l'ordre de 1% pour les gaz) va conduire à des incertitudes sur la composition réelle du mélange réactionnel souhaitée au sein du réacteur. Ces erreurs sur la température et la composition du mélange réactionnel ont un impact sur la composition des produits formés pendant le processus d'oxydation.

Pour ce qui est du système analytique, les erreurs sur la pression d'injection des gaz (0,2%), la résolution des pics chromatographiques lors des analyses (mauvaise séparation de certains pics conduisant à une intégration moins précise) et sur la détermination des coefficients de réponse (5% en général mais la plus importante en utilisant la règle du nombre de carbone effectif) induisent aussi des incertitudes sur la quantification des produits gazeux prélevés à la sortie du réacteur.

Les facteurs d'incertitude introduits ci-dessus nous permettent d'estimer une incertitude globale sur nos résultats expérimentaux inférieure à 12%.

3.4 Conclusion

Le réacteur auto-agité par jets gazeux utilisé dans nos expériences permet d'étudier la cinétique d'oxydation des hydrocarbures dans un large domaine de température et de richesse. Les expériences seront menées à une pression et un temps de passage constants (P=10atm et τ= 1s).

Les techniques d'analyse dont nous disposons, soit la spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier IRTF et la chromatographie en phase gazeuse CPG couplée avec plusieurs détecteurs (FID, TCD et SM), vont nous permettre l'identification et la quantification des produits de combustion formés lors de nos expériences.

Références bibliographiques

[1] P. Dagaut, M. Cathonnet, J-P. Rouan, R. Foulatier, A. Quilgars, J-C. Boettner, F. Gaillard and H. James

A Jet-Stirred Reactor for Kinetic-Studies of Homogeneous Gas-Phase Reactions at Pressures up to 10-Atmospheres (~ 1 MPa), Journal of Physics E-Scientific Instruments, 1986, vol. 19, pp. 207-209

[2] D. Matras et J. Villermaux

Un réacteur continu parfaitement agité par jets gazeux pour l'étude de la cinétique de réactions rapides, Chemical Engineering Science, 1973 vol. 28, 129

[3] R. David et D. Matras

Règles de construction et d'extrapolation des réacteurs auto-agités par jets gazeux Canadian Journal of Chemical Engineering, 1975, vol. 53, pp. 297-300

CHAPITRE 4 :

MODÉLISATION

4 Modélisation 117

4.1 Le logiciel CHEMKIN 118

4.1.1 Le mécanisme réactionnel 119

4.1.2 Les données thermodynamiques 119

4.1.3 Le code de calcul Performed Stirred Reactor 120

4.2 Les Mécanismes cinétiques 123

4.2.1 Sous mécanismes C_0-C_4 124

4.2.2 Mécanisme d'oxydation du kérosène 124

4.2.3 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures lourds 125

4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes reformulés et de synthèse 137

4.3 Conclusion 144

Références bibliographiques 145

4 Modélisation

L'utilisation des carburants reformulés comme alternative aux kérosènes conventionnels implique une meilleure connaissance de leurs mécanismes de combustion. Par conséquent la modélisation est un outil indispensable pour le développement de ces nouveaux carburants. L'évolution de la technologie a permis à la modélisation d'avoir une place importante dans la conception des carburants reformulés destinés aux aéronefs.

La modélisation permet d'avoir une meilleure compréhension de la chimie de combustion des carburants, des mécanismes réactionnels mis en jeu. Elle permet la validation des résultats menés expérimentalement (dans notre cas en réacteur-auto agité), et à la limitation des expériences qui sont généralement coûteuses.

La différence de composition entre un kérosène conventionnel et un kérosène reformulé ne permet généralement pas de modéliser l'oxydation de ces carburéacteurs alternatifs à partir des models de combustion d'un kérosène classique. On se doit donc de développer un modèle cinétique pour l'oxydation des kérosènes reformulés.

Pour modéliser nos résultats obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux, nous avons utilisé le package « CHEMKIN ». Ce chapitre présente les outils utilisés et les règles de construction du mécanisme cinétique.

4.1 Le logiciel CHEMKIN

Le logiciel CHEMKIN-II a été développé par Kee *et al* [1] en 1989 aux États-Unis dans les laboratoires de Livermore (Sandia National Laboratories). Il permet d'interpréter l'ensemble du mécanisme réactionnel regroupé sous la forme de deux fichiers. L'un des fichiers contient les espèces mises en jeu dans le mécanisme, l'ensemble des réactions chimiques ainsi que leurs paramètres cinétiques. L'autre fichier contient toutes les données thermodynamiques des différentes espèces présentes dans le mécanisme élaboré. L'interpréteur CHEMKIN II va donc lire ces deux fichiers tout en vérifiant la balance atomique des réactions chimiques, en calculant les constantes de vitesse inverses via la constante d'équilibre et pour finir générer un fichier de liaison binaire.

Le code de calcul utilisé pour la simulation des réactions chimiques initiées dans le réacteur auto-agité par jets gazeux est appelé Perfectly Stirred Reactor ou encore PSR. Cette application de CHEMKIN va donc utiliser le fichier binaire généré par l'interpréteur pour créer des fichiers de sortie au format texte contenant les résultats de modélisation demandés par l'utilisateur tels que les concentrations des espèces mises en jeu, les vitesses de consommation et de formation, les analyses de sensibilité et de voies réactionnelles.

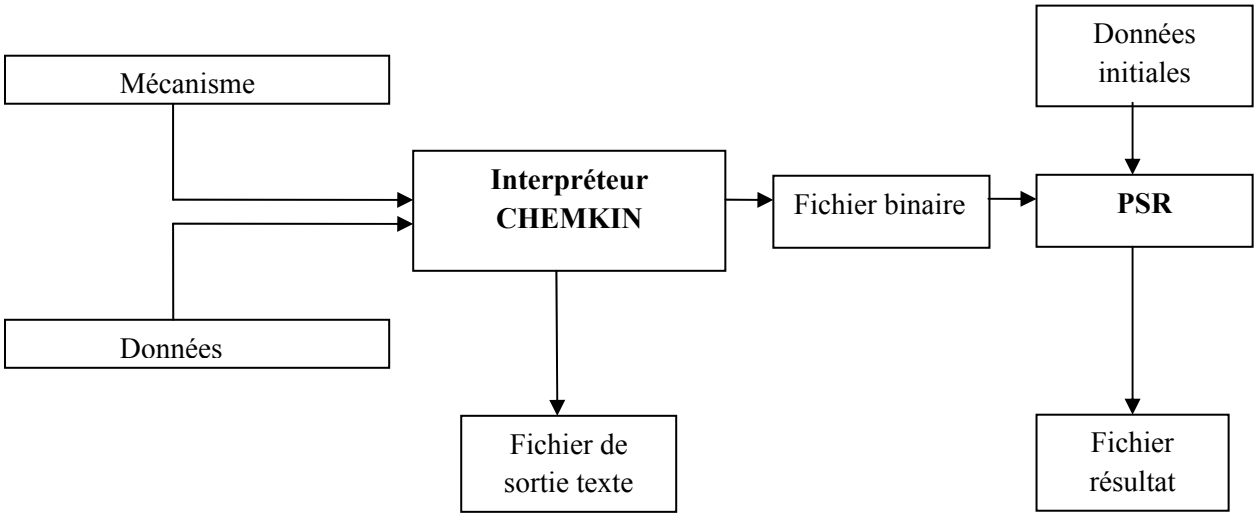


Figure IV.1: Structure du mode de fonctionnement du logiciel CHEMKIN

4.1.1 Le mécanisme réactionnel

Le mécanisme réactionnel est divisé en trois parties. Dans la première partie on y trouve les différents éléments chimiques intervenant dans le mécanisme. Dans la deuxième partie sont déclarées les différentes espèces mises en jeu dans le mécanisme réactionnel. La dernière partie est composée de l'intégralité des réactions chimiques du mécanisme. Ce fichier contient donc toutes les informations nécessaires à la lecture du mécanisme par le logiciel CHEMKIN-II.

Les réactions présentes dans le mécanisme peuvent être considérées de manière réversible ou irréversible. Les paramètres cinétiques sont indiqués à la suite de chaque réaction. Ils sont fournis sous la forme de trois coefficients A (cm^3, mole, s^{-1}), n et E ($cal.mol^{-1}$) représentant respectivement le facteur pré-exponentiel, le coefficient correctif de variation du facteur pré-exponentiel avec la température et l'énergie d'activation. Chacun de ces coefficients correspond à un paramètre de l'équation d'Arrhenius modifiée:

$$k = A \times T^n \times \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

avec :

T : température [K]

R : constante des gaz parfaits [$cal.K^{-1}.mol^{-1}$]

4.1.2 Les données thermodynamiques

Les données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme sont fournies sous forme de coefficients de polynômes élaborés par la NASA « Chemical Equilibrium Program » [2]. Le format NASA introduit 2 séries de 7 coefficients ($a_{1,k}...a_{7,k}$) qui permettent de calculer les propriétés thermodynamiques dans deux domaines de températures distincts, entre 1000 et 5000 K et entre 300 et 1000 K. Les propriétés thermodynamiques (capacité calorifique, enthalpie et entropie) sont calculées à partir des équations ci-dessous:

$$\frac{C_{p,k}}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4$$

$$\frac{H_k^{\,0}}{RT} = a_{1,k} + a_{2,k}\frac{T}{2} + a_{3,k}\frac{T^2}{3} + a_{4,k}\frac{T^3}{4} + a_{5,k}\frac{T^4}{5} + a_{6,k}\frac{1}{T}$$

$$\frac{S_k^{\,0}}{R} = a_{1,k}\ln T + a_{2,k}T + a_{3,k}\frac{T^2}{2} + a_{4,k}\frac{T^3}{3} + a_{5,k}\frac{T^4}{4} + a_{7,k}$$

L'équation $G^0 = H^0 + TS^0$ permet le calcul de l'enthalpie libre G^0. D'où le calcul des constantes d'équilibre des différentes réactions du mécanisme ainsi que les constantes de vitesse des réactions inverses.

$$\Delta rG^0 = G^0{}_{produits} - G^0{}_{réactifs} = -RT\ln(K_p)$$

$$K_c = \frac{K_{dir}}{K_{rev}} = K_p\left(\frac{P}{RT}\right)^{\Sigma\nu_{produits}-\Sigma\nu_{réactifs}}$$

avec C_p : capacité calorifique à pression constante

H : enthalpie

S : entropie

ν : coefficients stoechiométriques

Le programme informatique THERGAS [3] nous a permis de calculer certaines données thermodynamiques des molécules et des radicaux libres présents en phase gazeuse dans le mécanisme réactionnel. Ces données ont été par la suite rajoutées dans le fichier thermodynamique therm.dat.

4.1.3 Le code de calcul Performed Stirred Reactor

Le logiciel CHEMKIN II regroupe plusieurs codes de calcul dont PSR. Ce code de calcul a été développé par Glarborg *et al* [4] et permet de résoudre les équations de conservation de matière et d'énergie propres au réacteur auto-agité.

✓ Equations du réacteur auto-agité par jets gazeux

Le réacteur est caractérisé par un volume V, un temps de passage τ, et un flux massique $\dot{m}$, et une fraction massique Y_k. Le débit massique est considéré constant. Dans la relation ci-dessous on exprime le temps de passage τ en fonction du flux massique, du volume et de la masse volumique ρ.

$$\tau = \rho\left(\frac{V}{\dot{m}}\right) \qquad \rho = \frac{P\bar{M}}{RT}$$

Dans le cas du réacteur auto-agité par jets gazeux, on a une homogénéité en température et en composition dans tout le volume réactionnel. Le régime étant stationnaire, les principes qui régissent le fonctionnement du JSR sont la conservation de la masse et de l'énergie.

La conservation de la masse est exprimée par:

$$\dot{m}\left(Y_{k,S} - Y_{k,E}\right) - \dot{\omega} M_k V = 0$$

La conservation de l'énergie est exprimée par:

$$\dot{m} \sum_{k=1}^{K}\left(Y_{k,S} h_{k,S} - Y_{k,E} h_{k,E}\right) + Q = 0$$

avec $Y_{k,E}$: fraction massique de l'espèce k à l'entrée du JSR

$Y_{k,S}$: fraction massique de l'espèce k à la sortie du JSR

$\dot{\omega}_k$: vitesse nette de production de l'espèce k

M_k : masse molaire de l'espèce k

Q : perte thermique du JSR

$h_{k,E}$: enthalpie massique de l'espèce k à l'entrée du JSR

$h_{k,S}$: enthalpie massique de l'espèce k à la sortie du JSR

Les solutions des équations de conservation de la masse et de l'énergie sont les fractions massiques des espèces présentes dans le mécanisme et la température. Ces équations décrivent un système de K+1 équations algébriques non linéaires.

- ✓ Résolution du système d'équation

Certains paramètres sont indispensables à la résolution du système à K+1 équations. Ces paramètres sont les concentrations des réactifs en entrée du JSR, le temps de passage, la température (elle est mesurée expérimentalement ce qui évite de résoudre les équations d'énergies), et le débit massique. Pour résoudre le système d'équation, la méthode Newton-Raphson nécessite une estimation initiale de la solution (concentration) dans le but de commencer le processus itératif. L'équilibre thermodynamique permet le calcul de la première estimation de la solution à partir d'un programme appelé STANJAN [5]. La détermination de la composition calculée à pression et température constantes a été obtenue en minimisant l'enthalpie libre de Gibbs.

Cependant dans certains cas l'estimation ne permet pas la convergence du système d'où une non résolution des équations. Dans ces conditions le système est intégré numériquement par des équations différentielles en régime transitoire. La solution obtenue est alors utilisée pour résoudre une nouvelle fois le système avec la méthode de Newton-Raphson.

- ✓ Analyse de voies réactionnelles

Cette analyse permet de déterminer les principales voies de consommation et de formation d'une espèce k présent dans le mécanisme réactionnel. Les vitesses globales de formation $V_{f,k}$ et de consommation $V_{c,k}$ de l'espèce k sont calculées par le code de calcul PSR et sont exprimées par:

$$V_{f,k} = \sum_{i=1}^{I} v_{f,k,i} \qquad V_{c,k} = \sum_{i=1}^{I} v_{c,k,i}$$

Les coefficients d'influence de la réaction i sur la formation et la consommation peuvent être ainsi calculés.

✓ Analyses de sensibilité

Les calculs cinétiques permettent également d'effectuer des études de sensibilité sur une espèce k du mécanisme à une richesse et température fixe. Ces études permettent d'observer l'influence des réactions présentes dans le mécanisme sur la formation et la consommation de l'espèce k à analyser.

Le coefficient de sensibilité $S_{k,i}$ d'une espèce k pour une réaction i est donné par la relation suivante:

$$S_{k,i} = \frac{\partial \ln Y_k}{\partial \ln k_i} = \frac{k_i}{Y_k}\left(\frac{\partial Y_k}{\partial k_i}\right)$$

Il faut noter que pour un coefficient de sensibilité positif, la concentration de l'espèce k augmente avec la constante de vitesse k_i. A contrario, pour un coefficient de sensibilité négatif, la concentration de l'espèce k diminue lorsque la vitesse augmente.

4.2 Les Mécanismes cinétiques

Le développement d'un mécanisme cinétique chimique détaillé d'un hydrocarbure lourd ou d'un mélange d'hydrocarbures tel que le kérosène ou le kérosène reformulé nécessite dans un premier temps l'élaboration d'un sous mécanisme de base C_0-C_4 (cf. Figure IV.2). Ce sous mécanisme regroupe les réactions communes des hydrocarbures faisant intervenir les espèces légères. Il joue un rôle essentiel dans l'oxydation des hydrocarbures supérieurs. Les réactions spécifiques à l'hydrocarbure lourd initial viennent s'ajouter à ce noyau commun C_0-C_4.

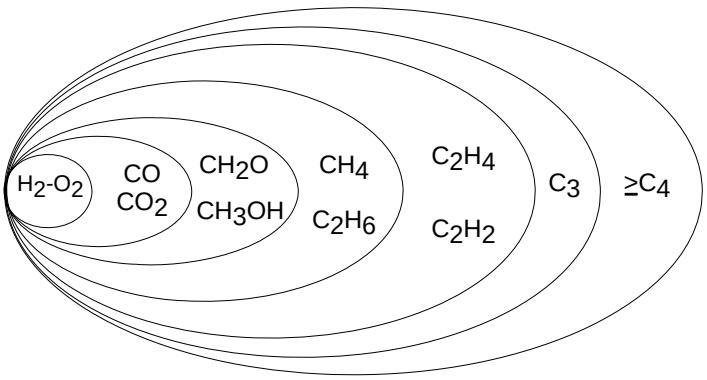


Figure IV.2: Structure schématique du sous mécanisme C_0-C_4

Nous avons donc utilisé le même principe pour la réalisation de nos modèles cinétiques lors des simulations des différentes oxydations menées dans le réacteur auto-agité par jets gazeux.

4.2.1 Sous mécanismes C_0-C_4

Ce sous mécanisme regroupe les réactions unimoléculaires et bimoléculaires des espèces de petites tailles. Les paramètres cinétiques utilisés sont pour la plupart issus de la littérature. Pour notre part nous avons utilisés les constantes de vitesse proposés par Diévart [6] dans ses travaux de thèse. La partie C_0-C_3 du mécanisme développé par Dievart est issue des travaux de Le Cong [33] auxquelles il a apporté quelques modifications concernant quelques paramètres cinétiques. Les constantes de vitesse utilisées pour la partie C_3-C_4 sont majoritairement basées des travaux menés par Yahyaoui [7].

4.2.2 Mécanisme d'oxydation du kérosène

Le kérosène ($C_{11}H_{22}$) est un mélange très complexe constitué de plusieurs milliers d'hydrocarbures. Comme nous l'avons vu précédemment, les principaux composés présents dans le kérosène sont des paraffines, des naphtènes et des hydrocarbures aromatiques [8, 9]. Les oléfines sont présentes mais en très faibles quantités [10]. Ainsi pour avoir une meilleure représentation de la chimie de combustion des carburéacteurs, on se doit d'utiliser des mélanges modèles constitués d'hydrocarbures lourds représentatifs des principales familles chimiques présentes dans le kérosène.

Dans la littérature le carburéacteur kérosène a été modélisé à partir de divers mélanges dont le mélange n-décane, n-propylcyclohexane et n-propylbenzène [8, 11, 12]. Ils représentent respectivement les familles des paraffines, des naphtènes et des aromatiques. Pour modéliser nos expériences d'oxydation du Jet A-1, nous avons utilisé le mécanisme développé par Diévart pour l'oxydation de carburant type gazole. Ce mécanisme regroupe les sous-mécanismes nécessaires pour la modélisation du kérosène conventionnel Jet A-1 (n-décane, n-propylcyclohexane et n-butylbenzène). De ce fait nous avons utilisé un mélange ternaire présenté ci-dessous:

4.2.3 Mécanisme d'oxydation des hydrocarbures lourds

hydrocarbure	n-décane	n-propylcyclohexane	n-butylbenzène
formule chimique	$C_{10}H_{22}$	C_9H_{18}	$C_{10}H_{14}$
fraction molaire (%)	37,47	24,18	38,35
concentration (ppm)	422,40	272,58	432,32

Tableau IV.1 : Composition utilisée pour la modélisation du kérosène

La proportion d'aromatiques dans le carburant modèle a été ajustée dans le but de représenter correctement la fraction molaire maximale de benzène. Le choix du n-butylbenzène s'explique par le fait qu'il présente une flamme froide tout comme le kérosène.

La formule brute du kérosène modèle est $C_{9,758}H_{17,964}$ avec un coefficient stoechiométrique Z = 14,249

$$X_{O2} = Z \times \frac{X_{HC}}{\phi} \qquad X_{HC} = 1127{,}3 \text{ ppm}$$

$$\text{et } X_{N2} = 1 - X_{HC} - X_{O2}$$

température (K)	temps de passage (s)	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
560-1030	1	10	0,5	$3{,}212.10^{-2}$	$9{,}667.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}606.10^{-2}$	$9{,}828.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$8{,}031.10^{-3}$	$9{,}908.10^{-1}$

Tableau IV.2 : Conditions de simulation (fraction molaire: 1127,3 ppm)

Construction des sous mécanismes C_{10}-C_{11}-C_{12}

Le mécanisme cinétique d'oxydation des hydrocarbures lourds a été écrit en s'appuyant sur les travaux de Diévart [6]. Le sous-mécanisme cinétique du n-décane a été initialement

généré par le logiciel EXGAS (version 1.0) puis modifié par Diévart dans ses travaux de thèse. Pour l'élaboration des sous mécanismes du n-undécane et du n-dodécane nous avons utilisé le même principe. De nouvelles espèces (en C_{11} et C_{12}) ont été déclarées dans le mécanisme réactionnel. Nous avons ainsi calculé leurs données thermodynamiques à partir du logiciel THERGAS [3] qui utilise la méthode d'additivité des groupes ou de liaisons proposée par Benson [13].

Toutefois, des modifications ont été apportées aux paramètres cinétiques des réactions d'initiation bimoléculaire et de métathèse entre le n-décane et le radical hydroperoxy HO_2. Ces nouvelles valeurs sont issues des travaux de Tsang *et al* [14] pour les réactions d'initiation bimoléculaires et de Scott *et al* [15] pour les réactions de métathèse. Le tableau suivant (Tableau IV.3) nous présente les changements apportés aux réactions de métathèse du n-décane avec le radical HO_2.

Réaction	**ancienne valeur [16]**	**nouvelle valeur [15]**
nc10h22+ho2⇌h2o2+Ac10h21	$4{,}0.10^{13}\exp(-17021/RT)$	$3{,}6.10^{4}T^{2,5}\exp(-16683/RT)$
nc10h22+ho2⇌h2o2+Bc10h21	$4{,}0.10^{13}\exp(-17021/RT)$	$4{,}0.10^{4}T^{2,5}\exp(-14208/RT)$
nc10h22+ho2⇌h2o2+Cc10h21	$4{,}0.10^{13}\exp(-17021/RT)$	$4{,}0.10^{4}T^{2,5}\exp(-14208/RT)$
nc10h22+ho2⇌h2o2+Dc10h21	$4{,}0.10^{13}\exp(-17021/RT)$	$4{,}0.10^{4}T^{2,5}\exp(-14208/RT)$
nc10h22+ho2⇌h2o2+Ec10h21	$4{,}0.10^{13}\exp(-17021/RT)$	$4{,}0.10^{4}T^{2,5}\exp(-14208/RT)$

Tableau IV.3 : Modifications apportées aux constantes cinétiques des réactions de métathèse du n-décane avec HO_2

Les constantes de vitesse des réactions de décompositions des radicaux par rupture C-C ont aussi été modifiées.

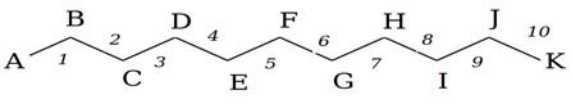
Réaction	A(s^{-1})	n	E (cal.mol^{-1})	Référence
Ac10h21⇌Ac8h17+c2h4	$9{,}120.10^{11}$	0,31	27240,5	
Bc10h21⇌Ac7h15+c3h6	$6{,}025.10^{10}$	0,84	27822,8	
Cc10h21⇌Ac6h13+c4h8	$2{,}041.10^{13}$	0,04	28496,5	
Cc10h21⇌ch3+c9h18-1	$9{,}550.10^{19}$	1,08	29390,7	Tsang *et al* [17]
Dc10h21⇌Ac5h11+c5h10	$2{,}041.10^{13}$	0,04	28496,7	
Dc10h21⇌c2h5+c8h16	$8{,}510.10^{9}$	1,11	27025,9	
Ec10h21⇌pc4h9+c6h12-1	$2{,}041.10^{13}$	0,04	28496,5	
Ec10h21⇌nc3h7+c7h14	$5{,}495.10^{13}$	0,055	28087,1	

Tableau IV.4: Paramètres cinétiques utilisés pour les réactions de rupture de liaisons C-C par β-scission dans le sous-mécanisme du n-décane

Le mécanisme développé a permis de modéliser l'oxydation des hydrocarbures lourds (n-undécane et n-dodécane) étudiés en réacteur auto-agité par jets gazeux. Le mécanisme cinétique de ces hydrocarbures lourds contient 1377 espèces et 5865 réactions réversibles.

Le tableau ci-dessus présente quelques exemples de la nomenclature utilisée dans le mécanisme cinétique des hydrocarbures lourds (allant jusqu'à C_{12}).

n-undécane ($C_{11}H_{24}$)



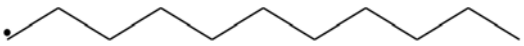
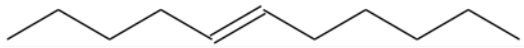
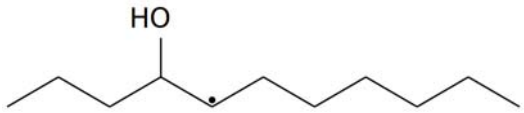
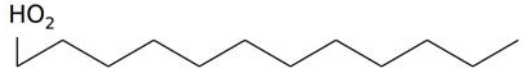
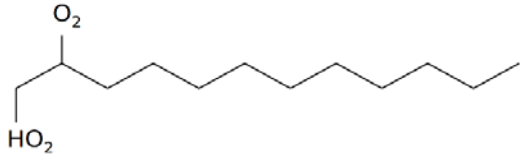
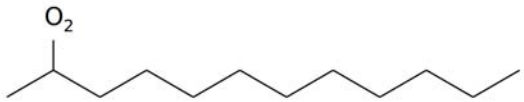
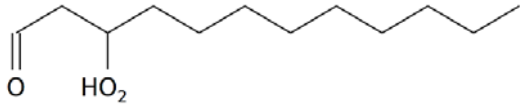
Acronymes	Formule développée
Ac11h23	
c11h22-5	
c11h22o-BC	
c11h22rEohD	
c12h25qA	
c12h24qjBqA	
c12h25qjB	
c12h23oAqC	

Tableau IV.5 : Exemple de nomenclature des espèces présentes dans le mécanisme (C_{10}-C_{11}-C_{12})

Le sous-mécanisme du n-undécane:

- ✓ Réactions d'initiation

Dans un premier temps les réactions d'initiation par amorçages unimoléculaires nc11h24 ⇌ R_1 + R_2 et bimoléculaires nc11h24 + O_2 ⇌ HO_2 + c11h23 ont été développées. Elles ont été complétées par les réactions de métathèse nc11h24 + X ⇌ HX + c11h23 avec (X= OH, HO_2, H, O, CH_3…).

Les constantes de vitesse utilisées pour les réactions unimoléculaires ont été estimées par Zeppieri *et al* [18]. Ces derniers paramètres étant élevés, nous les avons ré-estimé à partir

de la constante inverse de Westbrook *et al* [19] $k_{rev} = 8 \times 10^{12}$ s^{-1}. En ce qui concerne les réactions unimoléculaires de type nc11h24 ⇌ H + c11h23, les constantes de vitesse ont également été estimées à partir des constantes de vitesse inverses de Westbrook *et al* [19] avec $k_{rev} = 1 \times 10^{14}\ s^{-1}$. Ces réactions d'initiation unimoléculaires conduisent à la formation de deux radicaux par rupture des liaisons C-C ou d'un radical hydrocarboné et d'un atome d'hydrogène par rupture de liaison C-H.

Les constantes de vitesse des réactions bimoléculaires utilisées sont celles proposées par Tsang *et al* [14]. Ces réactions impliquent un arrachement d'atomes d'hydrogène de l'hydrocarbure initial par une molécule d'oxygène conduisant à la formation de radicaux hydroperoxy et de radicaux alkyles.

Dans le cas des réactions de métathèse avec les radicaux X (X = HO_2, O, H, CH_3, C_2H_5 et $C_{11}H_{23}$qj) nous avons utilisé les paramètres cinétiques issus des travaux de Westbrook *et al* [19]. Les vitesses de métathèse du n-undécane avec le radical hydroxyle OH ont également été estimées à partir des travaux de Westbrook *et al*. Ces réactions de métathèse conduisent à la formation de radicaux alkyles par arrachage des atomes d'hydrogène par des radicaux X. La constante de vitesse utilisée pour les réactions de métathèse entre le n-undécane et les radicaux peroxyalkyles $C_{11}H_{24}$qj avec un arrachement de l'atome d'hydrogène porté par l'atome de carbone primaire 'A' est donnée par la relation suivante:

$$k = 1 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{13400}{RT}\right) \quad [19]$$

Pour les réactions avec un atome d'hydrogène porté par les autres atomes de carbone secondaire 'B' à 'F', la constante cinétique est donnée par la relation:

$$k = 1 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{10400}{RT}\right) \quad [19]$$

- ✓ Réactions avec les radicaux undécyles $C_{11}H_{23}$

Elles concernent les réactions des radicaux alkyles $C_{11}H_{23}$ telles que les réactions de rupture par β-scission (C-C et C-H), les réactions d'additions sur la molécule d'oxygène, les réactions d'oxydations par attaque de petits radicaux O, OH et HO_2 et de décomposition.

Réaction	A (s^{-1})	n	E ($cal.mol^{-1}$)
Ac11h23⇌h+c11h22-1	$1{,}990.10^{13}$	-0,02	35861
Bc11h23⇌h+c11h22-1	$7{,}730.10^{12}$	0,19	36548
Bc11h23⇌h+c11h22-2	$1{,}080.10^{13}$	0,00	35288
Cc11h23⇌h+c11h22-2	$7{,}470.10^{12}$	0,04	35206
Cc11h23⇌h+c11h22-3	$4{,}030.10^{12}$	0,10	35036
Dc11h23⇌h+c11h22-3	$4{,}030.10^{12}$	0,10	35039
Dc11h23⇌h+c11h22-4	$4{,}020.10^{12}$	0,10	35037
Ec11h23⇌h+c11h22-4	$4{,}020.10^{12}$	0,10	35037
Ec11h23⇌h+c11h22-5	$2{,}190.10^{12}$	0,95	35055
Fc11h23⇌h+c11h22-5	$2{,}190.10^{12}$	0,95	35055

Tableau IV.6: Paramètres cinétiques utilisés pour les réactions de rupture de liaisons C-H par β-scission dans le sous-mécanisme undécane

Pour ces réactions, nous avons utilisé les constantes cinétiques provenant des travaux de thèse de Diévart sur le n-décane. Cependant, les constantes de vitesse des réactions de décomposition des radicaux par rupture de liaisons C-H ont été estimées à partir des constantes de vitesses inverses issues des travaux de Curran [20]. Ces réactions de rupture conduisent à la décomposition du radical alkyle initial pour former un atome d'hydrogène et un alcène. Les valeurs des constantes de vitesse utilisées pour des réactions d'isomérisation des radicaux alkyles $C_{11}H_{23}$ proviennent des travaux de Tsang [17] sur les radicaux octyles.

- ✓ Réactions avec les radicaux alkoxy $C_{11}H_{23}Oj$

La décomposition de ces radicaux RO conduit à la formation d'un aldéhyde et d'un radical alkyle. Les paramètres cinétiques utilisés pour ces réactions sont calculés à partir des constantes de vitesses inverses de Curran [20].

Le sous-mécanisme du n-dodécane:

✓ Réactions d'initiation

Les constantes de vitesse des réactions unimoléculaires de type nc12h26 ⇌ R_1 + R_2 sont calculées à partir des constantes de vitesses inverses estimées par Westbrook *et al* [19] avec $k_{rev} = 8 \times 10^{12}$ s^{-1}. Pour les réactions de type nc12h26 ⇌ H + c12h25, on a calculé les paramètres cinétiques à partir des constantes inverses de vitesse estimées par Westbrook avec $k_{rev} = 1 \times 10^{14}$ s^{-1}. Comme avec le n-undécane, les paramètres cinétiques des réactions bimoléculaires utilisées sont celles proposées par Tsang *et al* [14].

Concernant les réactions de métathèse avec les radicaux X (X = OH, HO_2, O, H, CH_3, C_2H_5 et $C_{12}H_{25}$qj) nous avons utilisé les constantes cinétiques proposées par Westbrook *et al* [19]. Le Tableau IV.7 présente les paramètres cinétiques utilisés pour les réactions de métathèse.

Réaction		A (s^{-1})	n	E (cal.mol^{-1})
nc12h26+h⇌h2+Ac12h25		$1{,}880.10^{5}$	2,75	6280
	rév/	$8{,}926.10^{3}$	2,70	10550
nc12h26+o⇌oh+Ac12h25		$1{,}930.10^{5}$	2,68	3716
	rév/	$4{,}025.10^{3}$	2 ,63	5893
nc12h26+oh⇌h2o+Ac12h25		$1{,}050.10^{10}$	0,97	1590
	rév/	$1{,}500.10^{10}$	1,05	23330
nc12h26+ho2⇌h2o2+Ac12h25		$1{,}680.10^{13}$	0	20440
	rév/	$2{,}050.10^{13}$	-0,38	8399
nc12h26+ch3⇌ch4+Ac12h25		$9{,}040.10^{-1}$	3,65	7154
	rév/	1,121	3,60	11910
nc12h26+c2h5⇌c2h6+Ac12h25		$1{,}000.10^{11}$	0,00	13400
	rév/	$3{,}200.10^{11}$	0,00	12300

Tableau IV.7 : Paramètres cinétiques utilisés pour les réactions de métathèse

(nc12h26+X⇌hX+Ac12h25)

✓ Réactions avec les radicaux dodécyles $C_{12}H_{25}$

De la même manière que pour le n-undécane, nous avons estimé les paramètres cinétiques des réactions de rupture de liaisons C-H par β-scission à partir des constantes cinétiques inverse provenant des travaux de Curran [20].

✓ Réactions avec les radicaux alkoxy $C_{12}H_{25}Oj$

Les paramètres cinétiques utilisés pour ces réactions de décomposition sont aussi calculés à partir des constantes de vitesses inverses de Curran [20].

Nous avons entre autre rajouté les réactions d'isomérisation des radicaux pour l'oxydation du n-dodécane tout en calculant leurs paramètres cinétiques. L'équation ci-dessous proposée par Brocard *et al* [21] permet de calculer le facteur pré-exponentiel A pour les constantes de vitesse d'isomérisation. La température étant constante et fixée à 800 K.

La formule de Brocard fait intervenir la température à la puissance 1, nous avons donc un coefficient correctif équivalent à 1 (n = 1).

$$A = e \times \frac{k_B T}{h} \times rpd \times \exp\left[\frac{\left(\Delta n^{TS}{}_{i,rot}\right) \times 3{,}5}{R}\right]$$

avec h : constante de Planck

k_B : constante de Boltzmann

rpd: facteur de dégénérescence, i.e. nombre d'atomes H arrachables

R: constante des gaz parfaits

$\Delta n_{\text{int},rot}$: variation du nombre de rotors (réactifs → état de transition)

L'énergie d'activation E pour les réactions d'isomérisation des radicaux est obtenue par la relation suivante:

$$E = E_{abst} + E_{cycle}$$

avec E_{abst}: énergie d'arrachage de l'atome l'hydrogène (Tableau IV.8)

E_{cycle}: énergie de tension de cycle de l'état de transition (Tableau IV.9)

Type d'atome H arraché	Primaire	Secondaire	Tertiaire
Arrachage par $ROO\cdot$ $(kcal.mol^{-1})$	20	17	14
Arrachage par $\cdot R$ $(kcal.mol^{-1})$	13.5	11	9

Tableau IV.8 : Energie d'arrachage (E_{abst}) de l'atome H [22]

Pour le calcul des énergies d'arrachage de l'atome d'hydrogène nous avons utilisé les valeurs moyennes qui ont été déterminées par le logiciel EXGAS.

Taille du cycle	4	5	6	7	8
Cycle avec 2 atomes $(kcal.mol^{-1})$	23	15.5	8	5	4
Cycle avec 0 ou 1 atome $(kcal.mol^{-1})$	26.0	6.3	1	6.4	9.9

Tableau IV.9 : Energie de tension de cycle de l'état de transition (E_{cycle}) [22]

La taille du cycle est nécessaire pour déterminer les énergies de cyclisation de l'état de transition [22]. Ces différents paramètres permettent le calcul des constantes de vitesse des réactions d'isomérisation des radicaux.

Le Tableau IV.10 présente les paramètres cinétiques (A, n et E) calculés pour quelques réactions d'isomérisation des radicaux pour le sous mécanisme proposé lors de la simulation de l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité.

Réactions		A (s^{-1})	n	E (cal.mol^{-1})
Ac12h25 ⇌ Cc12h25		$3{,}35.10^{9}$	1	37000
	rév/	$5{,}02.10^{9}$	1	39500
Ac12h25 ⇌ Dc12h25		$5{,}75.10^{8}$	1	17300
	rév/	$8{,}63.10^{8}$	1	19800
Ac12h25 ⇌ Ec12h25		$9{,}88.10^{7}$	1	12000
	rév/	$1{,}48.10^{8}$	1	14500
Ac12h25 ⇌ Fc12h25		$9{,}79.10^{6}$	1,08	17341
	rév/	$1{,}44.10^{7}$	1,08	19840
Bc12h25 ⇌ Dc12h25		$3{,}50.10^{9}$	1	37000
	rév/	$3{,}50.10^{9}$	1	37000
Bc12h25 ⇌ Ec12h25		$5{,}76.10^{8}$	1	17302
	rév/	$5{,}76.10^{8}$	1	17302
Bc12h25 ⇌ Fc12h25		$6{,}44.10^{7}$	1,06	11946
	rév/	$6{,}44.10^{7}$	1,06	11946
Cc12h25⇌ Dc12h25		$2{,}92.10^{6}$	1	20900
	rév/	$2{,}92.10^{6}$	1	20900

Tableau IV.10 : Exemples de paramètres cinétiques calculés pour les réactions d'isomérisation des radicaux (sous mécanisme n-dodécane)

Exemple détaillé: Ac12h25 ⇌ Cc12h25

- k: rpd = 2, Δ_{ni} = -2, taille du cycle = 4, K_B=1,38 x 10^{-23} $J.K^{-1}$, h = 6,626 x 10^{-34} J.s, type de l'atome de carbone portant l'hydrogène arraché = carbone secondaire

  A = 3,350 x 10^{9} s^{-1}

  $E = E_{abst} + E_{cycle}$ = 11000 + 26000 = 37000 cal.mol^{-1}

La constante de vitesse de la réaction d'isomérisation Ac12h25 ⇌ Cc12h25 s'écrit de la manière suivante:

$$k(s^{-1}) = 3{,}350 \times 10^{9} T \exp\left(-\frac{37000}{RT}\right)$$

- $k_{inverse}$: rpd = 3, Δ_{ni} = -2, taille du cycle = 4, K_B=1,38 x 10^{-23} J.K^{-1}, h = 6,626 x 10^{-34} J.s, type de l'atome de carbone portant l'hydrogène arraché = carbone primaire

A = 5,020 x 10^{9} s^{-1}

$E = E_{abst} + E_{cycle} = 13500 + 26000 = 39500$ cal.mol^{-1}

L'expression de la constante de vitesse inverse s'écrit de manière suivante:

$$k_{inverse}(s^{-1}) = 5{,}020 \times 10^{9} T \exp\left(-\frac{39500}{RT}\right)$$

Dans certains cas le calcul des paramètres cinétiques est plus complexe. En effet pour la réaction d'isomérisation Ac12h25 ⇌ Fc12h25, la constante de vitesse est la somme de k_1 et k_2. On a deux voies d'isomérisation possible pour la réaction directe (k_1 et k_2) et pour la réaction inverse ($k_{rev,1}$ et $k_{rev,2}$).

$$k = k_1 + k_2 \quad \text{et} \quad k_{inverse} = k_{inverse,1} + k_{inverse,2}$$

On procède de la même manière pour calculer les paramètres cinétiques de k_1 et k_2. On obtient :

	A (s^{-1})	**n**	**E (cal.mol^{-1})**
k_1	1,70.10^{7}	1	17400
k_2	3,00.10^{6}	1	20900

- $k = k_1 + k_2$ $\qquad k = A_t T^{nt} \exp\left(-\frac{E_t}{RT}\right)$

$$\ln k = \ln A_t + n_t \ln T - \frac{E_t}{RT}$$

$$\ln k - n_t \ln T = \ln A_t - \frac{E_t}{RT}$$

Nous avons par la suite tracé la droite: $\ln k - n_t \ln T = f\left(\frac{1}{T}\right)$.

L'équation de la droite est: $y = -8726{,}5x + 16{,}097$ avec $n_t = 1{,}08$ (pour avoir un meilleur coefficient de corrélation, $R^2 = 1$)

$$\ln A_t = 16{,}097 \text{ donc } A_t = \exp(16{,}097) = 9{,}79 \times 10^6$$

$$-\frac{E_t}{R} = -8726{,}5 \text{ donc } E_t = 8726{,}5 \times 1{,}9872 = 17341$$

Paramètres cinétiques de la réaction Ac12h25 → Cc12h25 sont :

$A = 9{,}79 \times 10^6\ s^{-1}$, $n = 1{,}08$, $E = 17341\ cal.mol^{-1}$

- $k_{inverse} = k_{inverse,1} + k_{inverse,2}$

	A (s^{-1})	**n**	**E ($cal.mol^{-1}$)**
$k_{invesre,1}$	$2{,}50.10^7$	1	19900
$k_{inverse,2}$	$4{,}40.10^6$	1	23400

De la même manière on obtient une droite dont l'équation est:

$$y = -9984{,}4x + 16{,}482 \text{ avec } n_t = 1{,}08 \text{ et } R^2 = 1$$

$$\ln A_t = 16{,}482 \text{ donc } A_t = \exp(16{,}482) = 1{,}44 \times 10^7$$

$$-\frac{E_t}{R} = -9984{,}4 \text{ donc } E_t = 19841$$

Paramètres cinétiques de la réaction inverse Cc12h25 → Ac12h25

$A = 1{,}44 \times 10^7\ s^{-1}$, $n = 1{,}08$, $E = 19841\ cal.mol^{-1}$

Les fractions molaires initiales (X_{O2} et X_{N2}) utilisées lors de la simulation du n-undécane et du n-dodécane sont présentés dans le tableau ci-dessous.

Température (K)	temps de passage (s)	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
560-1030	1	10	0,5	$3{,}400.10^{-2}$	$9{,}650.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}700.10^{-2}$	$9{,}820.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$8{,}500.10^{-3}$	$9{,}905.10^{-1}$

Tableau IV.11 : Conditions de simulation avec du n-undécane (fraction molaire : 1000 ppm)

Température (K)	temps de passage (s)	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
560-1030	1	10	0,5	$3{,}700.10^{-2}$	$9{,}620.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}850.10^{-2}$	$9{,}805.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$9{,}300.10^{-3}$	$9{,}898.10^{-1}$

Tableau IV.12 : Conditions de simulation avec du n-dodécane (fraction molaire : 1000 ppm)

4.2.4 Mécanisme d'oxydation de kérosènes reformulés et de synthèse

De la même manière qu'avec le kérosène, on va utiliser un mélange de carburants modèles pour reproduire le comportement de la combustion des carburéacteurs reformulés. Ainsi pour la simulation des carburants reformulés destinés au secteur aérien nous avons élaboré un mécanisme composé de plusieurs sous mécanismes.

4.2.4.1 Mécanisme d'oxydation du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10, en masse)

Les expériences faites sur l'oxydation d'un mélange entre un kérosène conventionnel et un alcool ont été simulées à partir d'un mécanisme cinétique chimique détaillé. Le présent

modèle regroupe le mécanisme du kérosène Jet A-1 (vu précédemment) et le sous mécanisme de l'hexan-1-ol.

Le sous-mécanisme de l'hexan-1-ol a été tiré des travaux de Togbé *et al* [23] effectués à Orléans. Il est basé sur les précédents mécanismes élaborés pour l'oxydation des alcools légers C_1-C_5 (du méthanol au pentan-1-ol) en réacteur auto agité et en flammes [24-27]. La formule brute du mélange modèle est $C_{9,271}H_{17,451}O_{0,129}$ avec Z = 13,57.

L'oxydation du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10, en masse) a été réalisée dans les conditions présentées dans les tableaux suivants.

hydrocarbure	**n-décane**	**n-propylcyclohexane**	**n-butylbenzène**	**hexan-1-ol**
formule chimique	$C_{10}H_{22}$	C_9H_{18}	$C_{10}H_{14}$	$C_6H_{14}O$
fraction molaire (%)	32,62	21,05	33,38	12,95
concentration (ppm)	361,69	233,41	370,19	143,65

Tableau IV.13 : Conditions pour la simulation de l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m)

Température (K)	**temps de passage (s)**	**pression (atm)**	**richesse Φ**	$\mathbf{X_{O2}}$	$\mathbf{X_{N2}}$
560-1030	1	10	0,5	$3{,}010.10^{-2}$	$9{,}688.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}505.10^{-2}$	$9{,}838.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$7{,}524.10^{-3}$	$9{,}914.10^{-1}$

Tableau IV.14 : Conditions pour la simulation de l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m)

La nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme de l'hexan-1-ol est présentée dans le tableau suivant.

Acronymes	Formule développée
hxol	
hxol3j	
hxol4e	
hxolcy2o1	

Tableau IV.15: Exemple de nomenclature des espèces présentes dans le mécanisme de l'hexan-1-ol

4.2.4.2 Mécanisme d'oxydation du mélange kérosène/ester méthylique d'huile de colza (90/10, en masse)

Dans le but de modéliser les résultats obtenus en réacteur auto-agité lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME, nous avons fusionné les mécanismes utilisés pour l'oxydation du kérosène à celui de l'octanoate de méthyle. Les sous-mécanismes des esters sont basés des travaux Dayma *et al* [28-30]. Le kérosène est représenté par le mélange modèle constitué de trois hydrocarbures, le n-décane, n-propylcyclohexane et n-butyllbenzène, alors que le RME (de formule brute $C_{19}H_{35}O_2$) est représenté par un mélange de n-décane ($C_{10}H_{22}$) et de octanoate de méthyle ($C_9H_{18}O_2$). Le mécanisme cinétique utilisé pour simuler l'oxydation du mélange Jet A-1/RME est composé de 2635 espèces et 10936 réactions. La formule brute du mélange modèle est $C_{9,734}H_{18,155}O_{0,1}$ avec Z = 14,22. Les concentrations des composés modèles utilisées pour la modélisation de l'oxydation du mélange kérosène/ester méthylique d'huile de colza (90/10, en masse) sont données dans le tableau suivant :

hydrocarbure	décane	propylcyclohexane	butylbenzène	méthyloctanoate
formule chimique	$C_{10}H_{22}$	C_9H_{18}	$C_{10}H_{14}$	$C_9H_{18}O_2$
fraction molaire (%)	38,64	21,92	34,76	4,68
concentration (ppm)	454,2	257,6	408,5	55

Tableau IV.16 : Composition utilisée pour la simulation de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m)

Les fractions molaires initiales (X_{O2} et X_{N2}) utilisées lors de la modélisation du mélange kérosène/RME pour différente richesses sont résumées dans le tableau ci-dessous.

Température (K)	temps de passage (s)	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
560-1030	1	10	0,5	$3{,}343.10^{-2}$	$9{,}654.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}672.10^{-2}$	$9{,}821.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$8{,}359.10^{-3}$	$9{,}905.10^{-1}$

Tableau IV.17 : Conditions pour la simulation de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m)

La nomenclature utilisée dans le sous-mécanisme de l'octanoate de méthyle est présentée dans le tableau suivant :

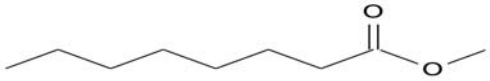
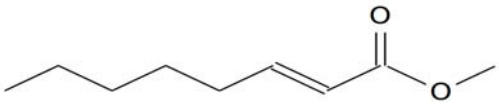
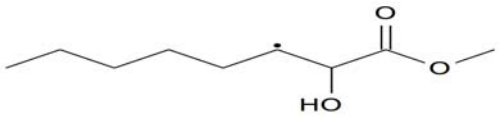
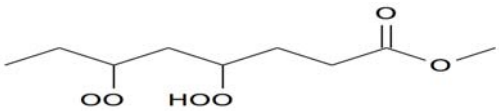
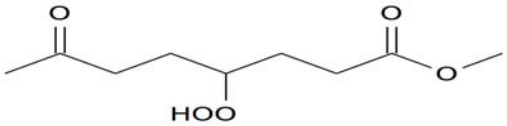
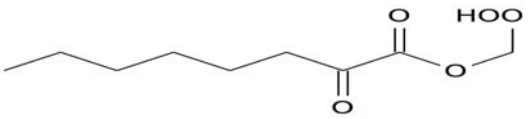
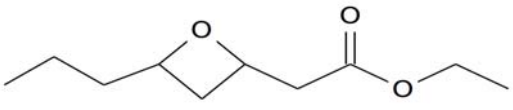
Acronymes	Formule développée
mo	
mo2d	
mo2oh3j	
mo4ooh6oo	
mo4ooh7_o	
momooh2_o	
mocy5o3	

Tableau IV.18: Exemple de nomenclature des espèces présentes dans le mécanisme de l'octanoate de méthyle

4.2.4.3 Mécanisme d'oxydation d'un kérosène de synthèse (SPK et SPK/Jet A-1)

Un mécanisme cinétique chimique détaillé a été développé pour l'oxydation d'un kérosène synthétique (SPK et SPK/Jet A-1). Le mécanisme regroupe les sous mécanismes du n-décane, n-propylcylohexane, n-butylbenzène et de l'iso-octane. Ces composés modèles représentent respectivement la famille des paraffines, des naphtènes, des aromatiques et des iso-paraffines. Le modèle cinétique élaboré est composé de 2111 espèces et 6917 réactions.

Le mélange n-décane, n-propylcylohexane et n-propylbenzène a souvent été choisi dans la littérature [8, 11, 12] pour simuler l'oxydation d'un kérosène conventionnel dans la zone de haute température (900-1300 K). Le sous-mécanisme du n-propylbenzène a été remplacé par celui du n-butylbenzène (voir plus haut). Nous avons introduit dans le mécanisme initial du kérosène (n-décane, n-propylcylohexane et n-butylbenzène) le sous-mécanisme de l'iso-octane dans le but de représenter l'oxydation du kérosène synthétique SPK, contenant une fraction importante d'iso-paraffines [31] et du mélange binaire SPK/Jet A-1 (50/50 % massique). Le Tableau IV.19 présente la composition du kérosène de synthèse SPK (IFP).

Pour modéliser l'oxydation du kérosène de synthèse (Synthetic Parafinic Kerosene, SPK) pur, nous avons utilisé un mélange modèle n-décane, n-butyllbenzène et iso-octane (voir Tableau IV.20). Les composés modèles ont été déterminés sur la base des travaux de Gokulakrishnan *et al* [32] qui ont mesuré les délais d'auto-inflammation du kérosène de synthèse S-8 (Syntroleum).

Le sous-mécanisme de l'iso-octane est issu des travaux effectués à Orléans par Dagaut et Togbé [26, 27].

Par ailleurs, on a utilisé un mélange n-décane, n-butylbenzène, iso-octane et n-propylcylohexane pour représenter l'oxydation du mélange binaire constitué en fraction massique de 50% d'un kérosène synthétique SPK et de 50% d'un kérosène commercial Jet A-1.

Famille chimique	% massique	Espèces principales (% massique)
n-paraffines	19,63	n-décane (2,3) n-undécane (4,2) n-dodécane (2,2) n-tetradécane (6,2)
iso-paraffines	79,88	méthyldodécane>méthyldécane>méthylnonane
aromatiques	0,49	C_7-C_{10}

Tableau IV.19 : Composition chimique du SPK (IFP)

Les Tableaux IV.20 et IV.21 présentent les fractions molaires utilisées pour la modélisation des oxydations menées en réacteur auto-agité entre 560 et 1030 K.

Carburant	n-décane	n-butylbenzène	iso-octane	n-propylcyclohexane
SPK (100%)	624,6	6	649,5	-
Jet A-1/SPK (50/50)	689	115	316	75,3

Tableau IV.20 : Fractions molaires en ppm des composés modèles pour la modélisation de l'oxydation du SPK et du mélange massique SPK/Jet A-1 (50/50, m/m)

SPK	SPK/Jet A-1	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
X_{HC}	-	10	0,5	$3{,}512.10^{-2}$	$9{,}636.10^{-1}$
X_{HC}	-	10	1	$1{,}756.10^{-2}$	$9{,}812.10^{-1}$
X_{HC}	-	10	2	$8{,}781.10^{-3}$	$9{,}899.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	0,5	$3{,}440.10^{-2}$	$9{,}644.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	1	$1{,}720.10^{-2}$	$9{,}816.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	2	$8{,}600.10^{-3}$	$9{,}902.10^{-1}$

Tableau IV.21 : Conditions de simulation de l'oxydation du SPK et du mélange massique Jet A-1/SPK (50/50, m/m), $560 \leq T\ (K) \leq 1030$, τ=1 s

Les formules brutes des mélanges modèles utilisées pour la simulation de l'oxydation du SPK et du mélange massique SPK/Jet A-1 (50/50) sont respectivement $C_{8,99}H_{19,93}$ avec Z = 13,72 et $C_{9,41}H_{19,92}$ avec Z = 14,39.

4.2.4.4 Mécanisme d'oxydation du GTL et CTL

Afin de représenter l'oxydation du kérosène de synthèse issue du gaz naturel (GTL, Shell), nous avons utilisé un mélange modèle constitué en fraction molaire du décane (90,6%) et de l'iso-octane (9,4%). Il n'y a pas de composés aromatiques dans le GTL.

Par ailleurs, nous avons utilisé un mélange modèle n-décane/iso-octane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène (39,5% /13% /37,3% /10,2% moles) pour modéliser le carburéacteur de synthèse issu du charbon (CTL, Sasol).

La concentration des composés modèles pour la modélisation de l'oxydation du GTL et du CTL est reportée dans les tableaux suivants.

Carburant	n-décane	iso-octane	n-propylcyclohexane	n-butylbenzène
GTL	965,1	100,1	-	-
CTL	466,2	153,5	440,3	120,4

Tableau IV.22 : Fractions molaires en ppm des composés modèles pour la modélisation des de l'oxydation du GTL et du CTL

GTL	CTL	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
X_{HC}	-	10	0,5	$3{,}242.10^{-2}$	$9{,}665.10^{-1}$
X_{HC}	-	10	1	$1{,}621.10^{-2}$	$9{,}827.10^{-1}$
X_{HC}	-	10	2	$8{,}104.10^{-3}$	$9{,}908.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	0,5	$3{,}343.10^{-2}$	$9{,}647.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	1	$1{,}672.10^{-2}$	$9{,}821.10^{-1}$
-	X_{HC}	10	2	$8{,}358.10^{-3}$	$9{,}905.10^{-1}$

Tableau IV.23: Conditions de simulation de l'oxydation du GTL et du CTL, $560 \leq T\ (K) \leq 1030$, τ=1 s

4.2.4.5 Mécanisme d'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, en volume)

Pour simuler l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v), nous avons utilisé un mélange modèle constitué de trois carburants: le n-décane (65,7%) l'iso-octane (6,8%) et l'hexan-1ol (27,5%). Le n-décane et l'iso-octane représentent le carburant de synthèse GTL (Shell). Les tableaux ci-dessous présentent les conditions numériques initiales utilisées pour modéliser l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, en volume).

Carburant	n-décane	iso-octane	hexan-1-ol
GTL/hexan-1-ol	687,75	71,18	287,87

Tableau IV.24 : Fractions molaires en ppm des composés modèles pour la modélisation de l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v)

Température (K)	temps de passage (s)	pression (atm)	richesse Φ	X_{O2}	X_{N2}
560-1030	1	10	0,5	$2{,}827.10^{-2}$	$9{,}707.10^{-1}$
560-1030	1	10	1	$1{,}413.10^{-2}$	$9{,}848.10^{-1}$
560-1030	1	10	2	$7{,}068.10^{-3}$	$9{,}919.10^{-1}$

Tableau IV.25 : Conditions de simulation de l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v)

4.3 Conclusion

Des sous-mécanismes cinétiques détaillés ont été élaborés pour modéliser l'oxydation de carburants-modèles. Leur assemblage a aussi été effectué afin de modéliser la combustion de kérosènes de synthèse et de kérosènes reformulés. La validation de ces mécanismes cinétiques se fera par confrontation des simulations avec les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux. Ces travaux seront présentés dans le prochain chapitre.

Références bibliographiques

[1] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller

CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics, in SAND89-8009, 1989, Sandia National Laboratories: Livermore, CA

[2] S. Gordon and B. J. McBride

Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and Chapman-Jouguet detonations, NASA SP-273, 1971

[3] C. Muller, V. Michel, G. Scacchi and G. M. Come

THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data molecules and free radicals in the gas phase, Journal de Chimie physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol 92, pp. 1154-1178

[4] P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar and J. A. Miller

PSR: A Fortran program for modelling well-stirred reactors, in SAND86-8209, 1986, Sandia National Laboratories: Livermore, CA

[5] C. W. Reynolds

The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN, 1986, Department of Mechanical Engineering: Stanford University

[6] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[7] M. Yahyaoui

Étude cinétique de la formation de polluants à partir de mélanges représentatifs des essences, Thèse, Université d'Orléans 2005

[8] P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[9] C. Guéret

Elaboration d'un modèle cinétique pour l'oxydation du kérosène et d'hydrocarbures représentatifs, Thèse, Université d'Orléans, 1989

[10] S. Honnet, K. Seshadri , U. Niemann and N. Peters

A surrogate fuel for kerosene, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 485-492

[11] P. Dagaut and S. Gail

Kinetics of gas turbine liquid fuels combustion: Jet A-1 and biokerosene, Proceedings of the ASME Turbo Expo, 2007, vol. 2

[12] P. Dagaut and S. Gail

Chemical kinetic study of the effect of a biofuel additive on Jet A-1 combustion, The Journal of Physical Chemistry A, 2007, vol. 111, pp. 3992-4000

[13] S. W. Benson

Thermochemical Kinetics, Second ed, 1976, New York: Wiley, Interscience

[14] W. Tsang

Chemical Kinetic Data Base for Combustion Chemistry. Part 3: Propane, Journal of Physical and Chemical Reference Data 17, 1988, 887, 65 p

[15] M. Scott and R. W. Walker

Addition of toluene and ethylbenzene to mixtures of H_2 and O_2 at 773 K: Part I: Kinetic measurement for H and HO_2 reactions with the additives and a data base for H abstraction by HO_2 from alkanes, aromatics and related compounds, 2002, Combustion and Flame, vol. 129, pp. 365-377

[16] G. Bikas and N. Peters

Kinetic modelling of n-decane combustion and auto-ignition, 2001, Combustion and Flame, vol. 126, pp. 1456-1475

[17] W. Tsang, W. Sean McGivern and J. A. Manion

Multichannel decomposition and isomerization of octyl radicals, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 131-138

[18] S. P. Zeppieri, S. D. Klotz and F. L. Dryer

Modeling concepts for larger carbon number alkanes: a partially reduced skeletal mechanism for n-decane oxidation and pyrolysis, Proceedings of The Combustion Institute, 2000, vol. 28, pp. 781-789

[19] C. K. Westbrook

A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane, Combustion and Flame, vol. 156, pp. 181-199

[20] H. J. Curran

Rate constant estimation for C_1 to C_4 alkyl and alkoxyl radical decomposition, International Journal of Chemical Kinetics, 2006, vol. 38, pp. 250-275

[21] J. C. Brocard, F. Baronnet and H. E. O'Neal

Chemical kinetics of the oxidation of methyl tert-butyl ether (MTBE), Combustion and Flame, 1983, vol. 52, pp. 25-35

[22] F. Battin-Leclerc, R. Bounaceur, G. M. Côme, R. Fournet, P. A. Glaude, G. Scacchi and V. Warth

A software for the automatic generation of mechanisms for the oxidation of alkanes,

[23] P. Dagaut, S. M. Sarathy and M. J. Thomson

A Chemical Kinetic Study of n-Butanol Oxidation at Elevated Pressure in a Jet Stirred Reactor, Proceedings of the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 229-237

[23] C. Togbé, P. Dagaut, A. Mzé-Ahmed and P. Diévart

Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of 1-Hexanol Oxidation in a Pressurized Jet-Stirred Reactor and a Combustion Bomb, Energy and Fuels, 2010, vol. 24, pp. 5859-5875

[24] S. M. Sarathy, M. J. Thomson, C. Togbe, P. Dagaut, F. Halter and C. Mounaim-Rousselle

An experimental and kinetic modeling study of n-butanol combustion, Combustion and Flame, 2009, vol. 156, pp. 852-864

[25] C. Togbé, F. Halter, F. Foucher, C. Mounaim-Rousselle and P. Dagaut,

Experimental and detailed kinetic modeling study of 1-pentanol oxidation in a JSR and combustion in a bomb, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 367-374

[26] P. Dagaut and C. Togbé

Experimental and Modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol-gasoline Surrogate Mixtures (E85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3499-3505

[27] C. Togbé, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experimental and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of Methanol-Gasoline Surrogate Mixtures (M85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy and Fuels, 2009, vol. 23, pp. 1936-1941

[28] G. Dayma, S. Gaïl and P. Dagaut

Experimental and kinetic modelling study of the oxidation of methyl hexanoate, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 1469-1479

[29] G. Dayma, C. Togbé and P. Dagaut

Detailed kinetic mechanism for the oxidation of vegetable oil methyl esters: new evidence from methyl heptanoate, Energy and Fuels, 2009, vol. 23, pp. 4254-4268

[30] C. Togbé, G. Dayma, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experiment and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of simple Biodiesel-Biobutanol Surrogates: Methyl octanoate-Butanol Mixtures, Energy and Fuels, 2010, vol. 24, pp. 3906-3916

[31] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng and T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[32] P. Gokulakrishnan, M. S. Klassen and R. J. Roby

Ignition Characteristics of a Fischer-Tropsch Synthetic Jet Fuel, Proceedings of ASME Turbo Expo, 2008, vol. 3, Pts A and B, pp. 921-929

[33] T. Le Cong

Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion de combustibles gazeux : méthane, gaz naturel et mélanges contenant de l'hydrogène, du monoxyde de carbone et de l'eau, Thèse, Université d'Orléans 2008

CHAPITRE 5 :

RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX ET VALIDATION DES MODÈLES CINÉTIQUES

5 Résultats expérimentaux et validation des modèles cinétiques . 153

5.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 153

5.1.1 Conditions expérimentales 153

5.1.2 Résultats expérimentaux 154

5.1.3 Confrontation expérience-modèle 155

5.1.4 Analyse de sensibilité 160

5.2 Étude cinétique de l'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions 164

5.2.1 Oxydation du n-undécane et validation du modèle 164

5.2.2 Oxydation du n-dodécane et validation du modèle 178

5.2.3 Comparaison entre le modèle développé, un modèle issu de la littérature et les résultats expérimentaux obtenus en milieu stoechiométrique 192

5.2.4 Oxydation du n-tétradécane 195

5.2.5 Étude comparative entre l'oxydation des hydrocarbures lourds 204

5.2.6 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du n-undécane à $\Phi = 1$ 205

5.3 Étude cinétique de l'oxydation de kérosènes reformulés 207

5.3.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, en masse) 208

5.3.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10 en masse) à $\Phi = 1$ 218

5.3.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1/RME (90/10, m/m) 220

5.3.4 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/RME (90/10 en masse) à $\Phi = 1$ 229

5.4 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation de kérosènes de synthèse 231

5.4.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur, SPK (IFP) 232

5.4.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du kérosène de synthèse SPK, à Φ = 1 241

5.4.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1/kérosène de synthèse SPK (50/50, en masse) 242

5.4.4 Études expérimentales et modélisation des oxydations des kérosènes de synthèse GTL (Gas To Liquid) et CTL (Coal To Liquid) 247

5.4.5 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et des carburéacteurs de synthèse GTL (Shell), CTL (Sasol) 257

5.4.6 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange GTL /hexan-1-ol (80/20, v/v) 260

5.4.7 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène de synthèse GTL (Shell) et d'un mélange GTL(Shell)/hexan-1-ol (80/20, v/v) 266

5.5 Conclusion 268

Références bibliographiques 269

6 Conclusion générale 273

Références bibliographiques 279

7 ANNEXES 281

Références bibliographiques 291

5 Résultats expérimentaux et validation des modèles cinétiques

5.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1

La première partie de ce chapitre présente les travaux effectués à l' Institut de Combustion Aérothermique Réactivité et Environnement d'Orléans sur l'oxydation d'un carburéacteur conventionnel (le Jet A-1). Un mécanisme cinétique de basse et haute température développé par Diévart [1] lors de ces travaux de thèse pour la modélisation d'un carburant type diesel a été confronté aux résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR).

5.1.1 Conditions expérimentales

L'oxydation du kérosène Jet A-1 (M=154 $g.mol^{-1}$; ρ=0,8 $g.cm^{-3}$) a été étudiée expérimentalement en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) dans un large domaine de température ($560 \leq T\ (K) \leq 1030$), à haute pression (10 atm) et à des richesses comprises entre 0,5 et 2. Dans nos expériences le temps de passage a été maintenu constant (τ=1 s).

Le tableau ci-dessous présente les conditions expérimentales dans lesquelles l'oxydation du kérosène Jet A-1 a été menée en réacteur auto-agité.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{kérosène}$	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}300.10^{-2}$	$9{,}660.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}650.10^{-2}$	$9{,}825.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$8{,}250.10^{-3}$	$9{,}908.10^{-1}$	2

Tableau V.1 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du kérosène Jet A-1 en JSR

Les résultats obtenus sont les profils de concentrations des espèces chimiques stables (réactifs, espèces intermédiaires et produits) présentes lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1

en fonction de la température pour trois richesses différentes (milieu pauvre, stoechiométrie et milieu riche).

5.1.2 Résultats expérimentaux

Les différents dispositifs d'analyse cités précédemment (voir chapitre III) ont permis l'identification de plusieurs produits lors de la combustion du kérosène Jet A-1. On observe dans ces expériences les trois régimes d'oxydation:

- flamme froide ($T < 650$ K)
- coefficient négatif de température ($650 \leq T\ (K) \leq 740$)
- haute température ($T > 740$ K)

Les résultats obtenus pour l'oxydation du Jet A-1 sont représentés sur les Figures V.1, V.2 et V.3.

Le domaine de basse température est caractérisé par la formation d'espèces oxygénées telles que le monoxyde de carbone (CO), l'eau (H_2O) et certains aldéhydes comme le formaldéhyde (CH_2O). On observe aussi la formation d'éthylène mais en plus faible quantité. Les fractions molaires maximales de ces espèces sont atteintes à une température de 650 K.

La zone de coefficient négatif de température CNT se caractérise par une chute de la réactivité du système. On observe bien une réduction de la production de CO et de CH_2O entre 650 et 740 K. Cette baisse de réactivité s'exprime aussi par la diminution de la concentration de dioxyde de carbone CO_2 dans la zone du CNT. Cette zone correspond à la diminution de la formation des radicaux OH remplacés par les radicaux HO_2 moins réactifs.

Dans le domaine de haute température on observe une importante production d'éthylène (C_2H_4), de méthane (CH_4), et d'hydrogène H_2. L'hydrocarbure imbrûlé CH_4 est l'alcane intermédiaire majoritairement formé. L'acétaldéhyde (CH_3CHO) et le propène (C_3H_6) sont également formés en grande quantité. D'autres espèces minoritaires sont formés telles que l'éthane (C_2H_6), les alcènes (but-1-ène, buta-1,3-diène, pent-1-ène, hex-1-ène), l'acétylène (C_2H_2), des aldéhydes dont le propanal (C_2H_5CHO), l'acroléine (C_3H_4O) et certains composés aromatiques tels que le benzène (C_6H_6) et le toluène (C_7H_8).

Les résultats obtenus dans cette étude sont en accord avec celles de Cathonnet *et al* [2] et Dagaut *et al* [3]. Cette étude de l'oxydation du kérosène Jet -A1 nous a permis d'identifier

des polluants de l'air ainsi que des composés ayant un impact sur l'augmentation de l'effet de serre. En effet l'acétaldéhyde, le formaldéhyde, le buta-1,3-diène et le benzène sont des composés classés comme étant des polluants toxiques de l'air (TAP). Le monoxyde de carbone qui est l'espèce majoritaire identifiée est un composé toxique. Ces polluants ont un impact néfaste sur l'environnement et la santé humaine. Par ailleurs le méthane et le dioxyde de carbone sont des gaz à effet de serre.

5.1.3 Confrontation expérience-modèle

Comme introduit précédemment (voir chapitre IV), le mélange modèle utilisé pour représenter l'oxydation du kérosène est constitué du n-décane, du n-propylcyclohexane et du n-butylbenzène. Les figures ci-dessous présentent une comparaison entre les profils de concentrations expérimentales et ceux issus de la modélisation en fonction de la température (560-1030 K) pour Φ = 0,5, 1 et 2. Cette comparaison expérience-modèle a pour but de valider le mécanisme cinétique détaillé de basse et haute température utilisé pour simuler l'oxydation du kérosène. Globalement, les profils simulés représentent correctement les trois régimes d'oxydation observés dans nos expériences.

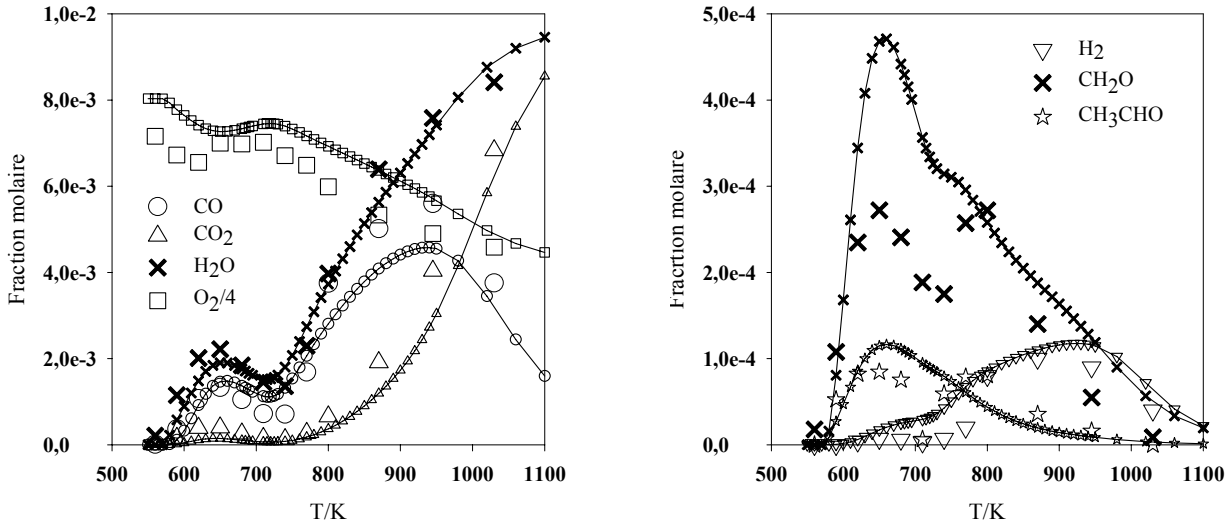


Figure V.1: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,3%; X_{N2}=96,6% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=3,212% ; X_{N2}=96,675%

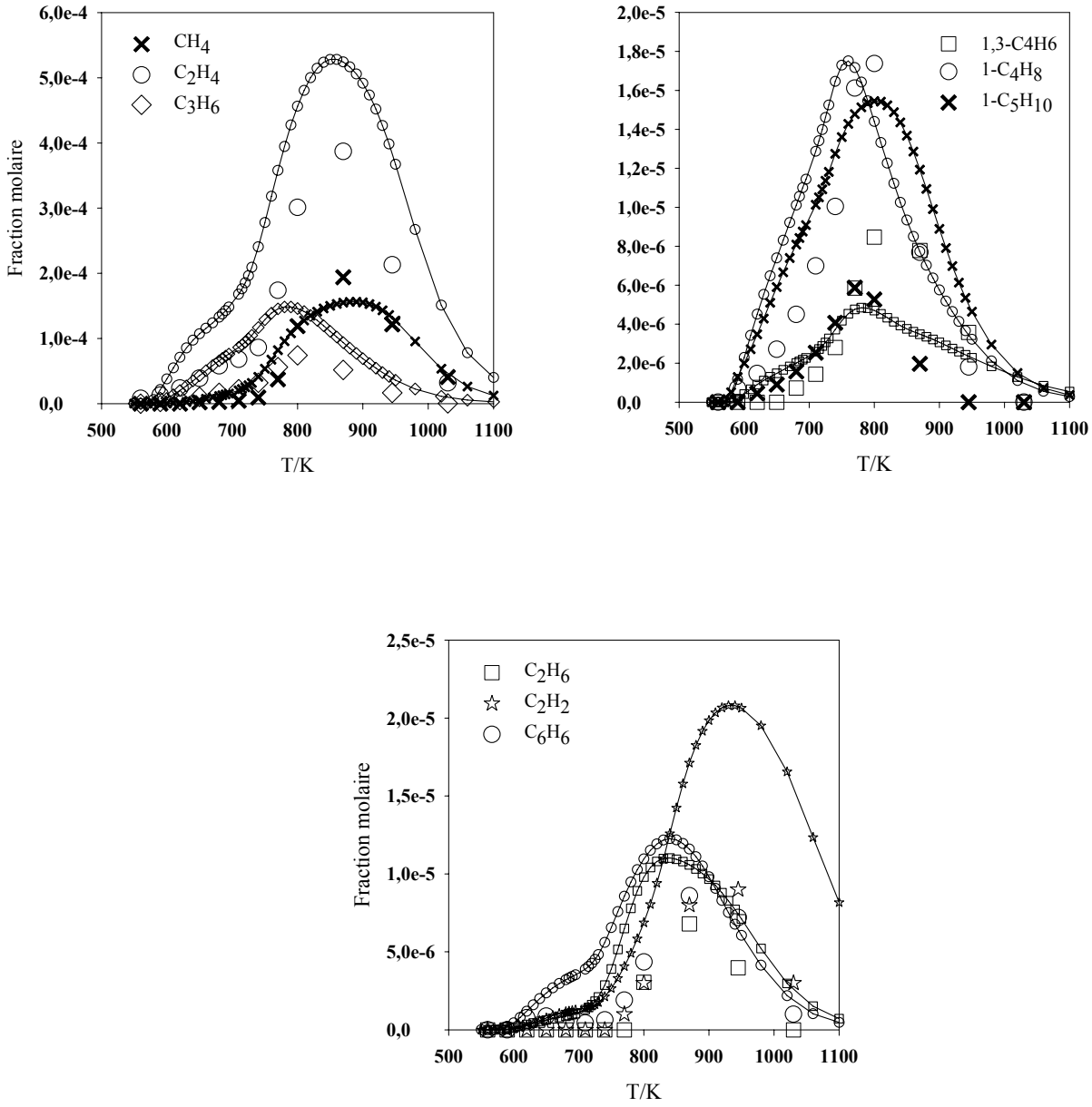


Figure V.1: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,3% ; X_{N2}=96,6% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=3,212% ; X_{N2}=96,675%

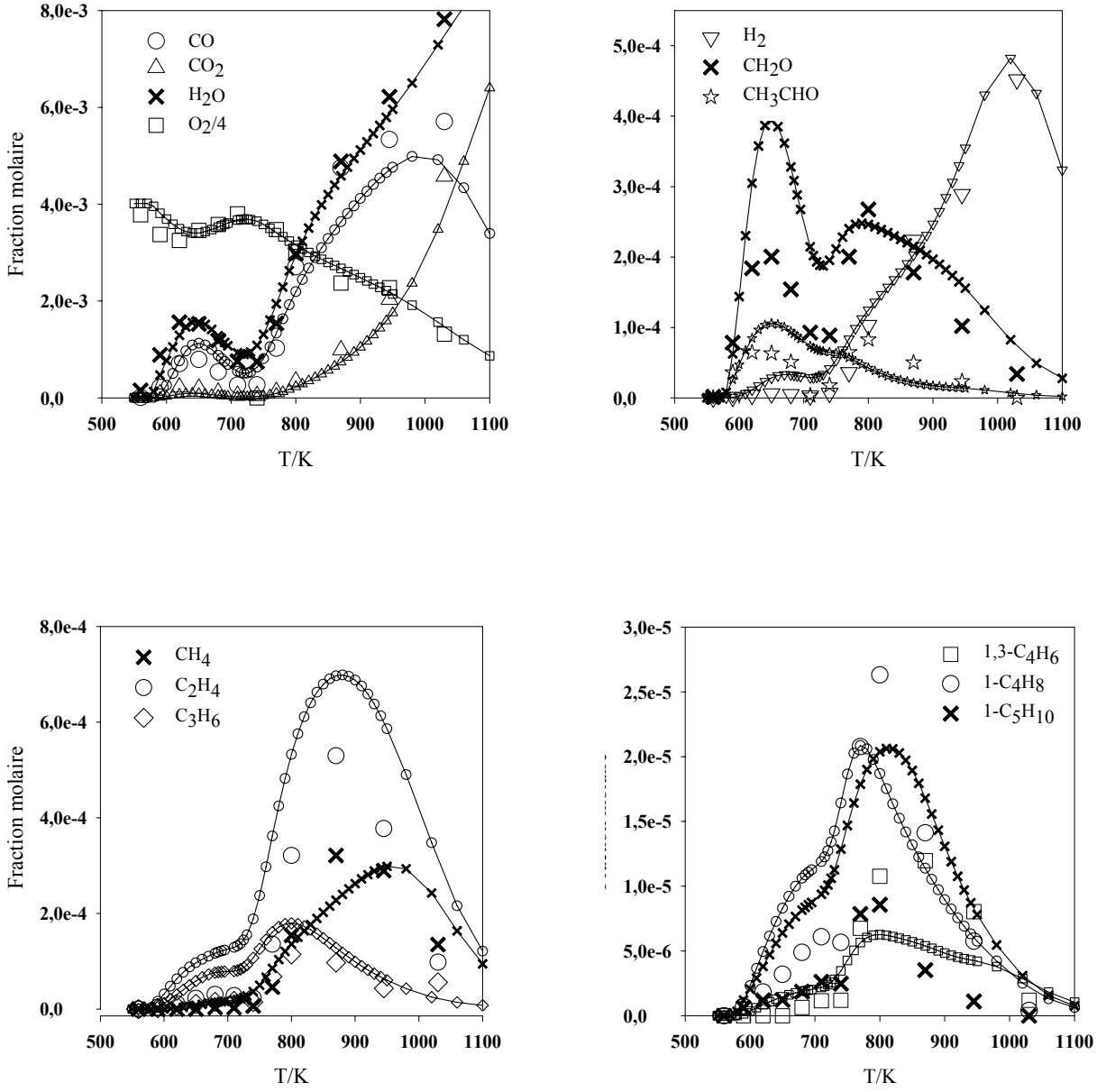


Figure V.2: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,65% ; X_{N2}=98,25% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=1,606% ; X_{N2}=98,281%

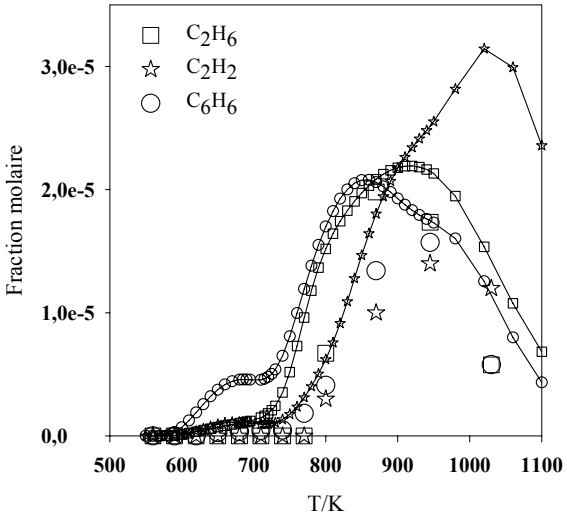


Figure V.2: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,65%; X_{N2}=98,25% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=1,606% ; X_{N2}=98,281%

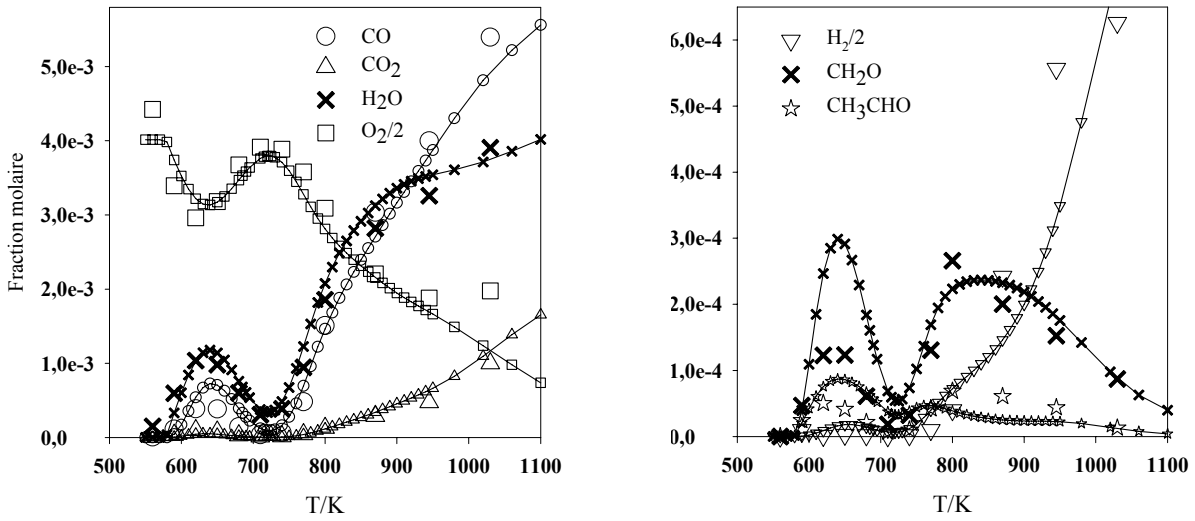


Figure V.3: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,825% ; X_{N2}=99,080% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=0,803% ; X_{N2}=99,08%

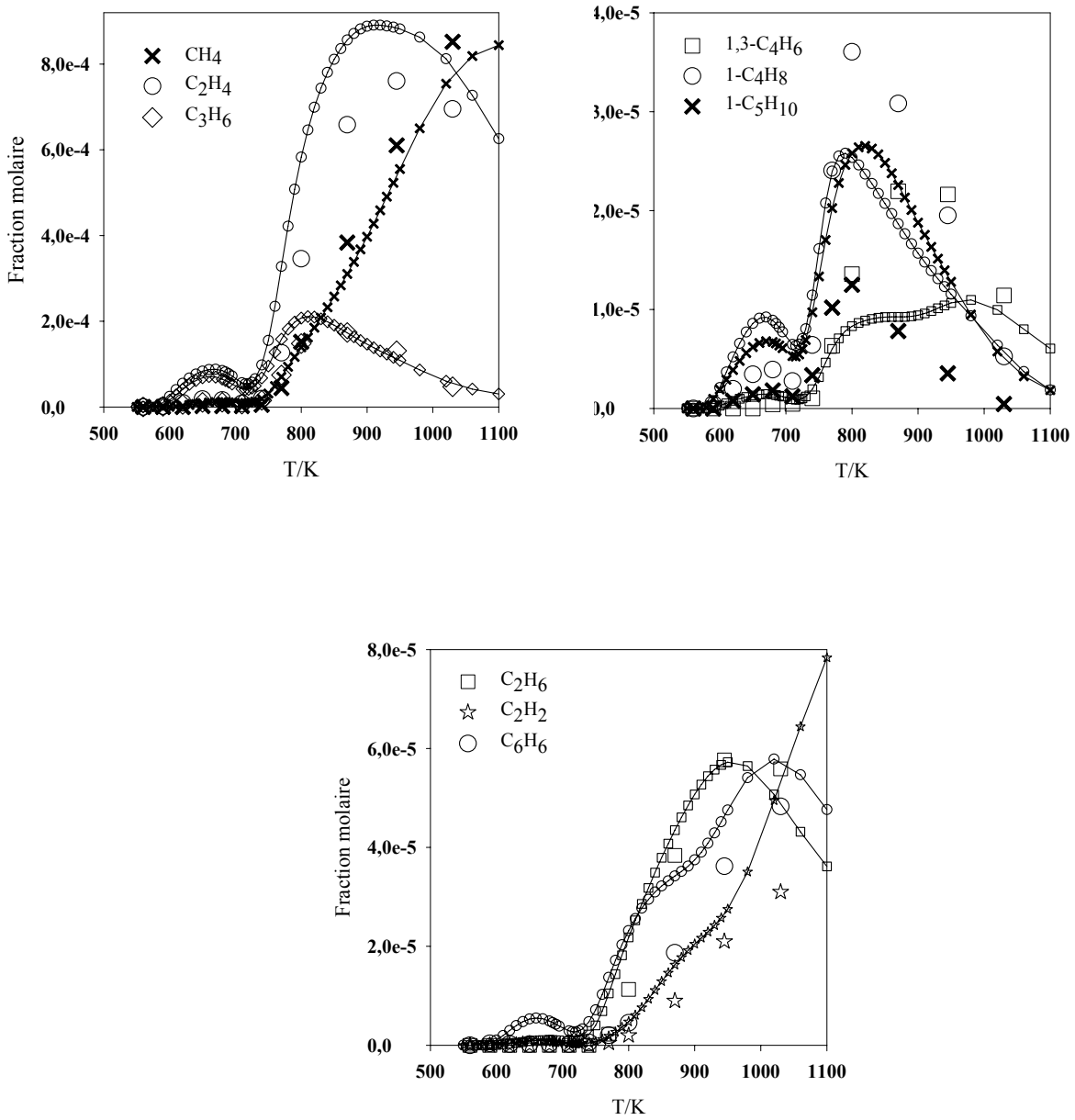


Figure V.3: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,825% ; X_{N2}=99,080% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0422% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0273% ; $X_{butylbenzène}$=0,0432% ; X_{O2}=0,803% ; X_{N2}=99,08%

Les résultats ci-dessus montrent que le modèle reproduit correctement les profils expérimentaux des espèces majoritaires telles que le monoxyde de carbone, l'eau, l'hydrogène et le méthane. La flamme froide est bien représentée par le modèle. Dans ce régime, le maximum de concentration des espèces formées lors de l'oxydation du carburéacteur Jet A-1

est atteint lorsque la température avoisine les 650 K. Le modèle simule convenablement le coefficient négatif de température. En effet entre 650 et 740 K on observe une chute de la production de CO et de l'H_2O. Les profils du dioxyde de carbone et de l'oxygène sont assez bien représentés par la simulation.

En milieu pauvre ($\Phi = 0,5$) et à la stoechiométrie, le modèle surestime d'un facteur deux la formation de formaldéhyde à basse température ainsi que celle de l'acétylène à haute température. Par contre en milieu riche ($\Phi = 2$), l'acétylène est assez bien reproduit par le modèle. Le formaldéhyde est toujours surestimé à basse température en milieu riche. Cependant le profil de formaldéhyde simulé se rapproche de celui mesuré pour les trois richesses à haute température. Les quantités d'éthane, d'éthylène et de pent-1-ène sont eux surestimées pour les différentes richesses. Par contre, en milieu riche le profil de l'éthane est reproduit convenablement. Le profil du propène est bien représenté à la stoechiométrie et en milieu riche pour des températures supérieures à 750 K. Les quantités d'acétaldéhyde sont surestimées à basse température et sous-estimées à haute température.

Le modèle sous-estime la formation du buta-1,3-diène pour les trois richesses. La formation du but-1-ène est surestimée à basse température mais sous-estimée à haute température. On obtient un bon accord entre le profil simulé et expérimental du but-1-ène en milieu pauvre. Le modèle surestime les quantités de benzène produites lors de l'oxydation du kérosène Jet - A1.

5.1.4 Analyse de sensibilité

Afin d'évaluer la dépendance des résultats vis-à-vis des paramètres cinétiques, des études de sensibilité ont été menées. Le dioxyde de carbone étant un produit de fin d'oxydation, il a été choisi pour ces analyses. Les études de sensibilité sur le dioxyde de carbone lors de l'oxydation du kérosène ont été menées en milieu pauvre ($\Phi=0,5$), à basse et haute température. Pour représenter la basse température nous avons choisi de mener nos analyses à T = 650 K, là où on observe le maximum de flamme froide. Concernant la haute température nous avons choisi la température T = 1030 K.

Les résultats des analyses de sensibilité à basse température ($\Phi=0,5$; T=650 K) sont présentés sur la Figure V.4.

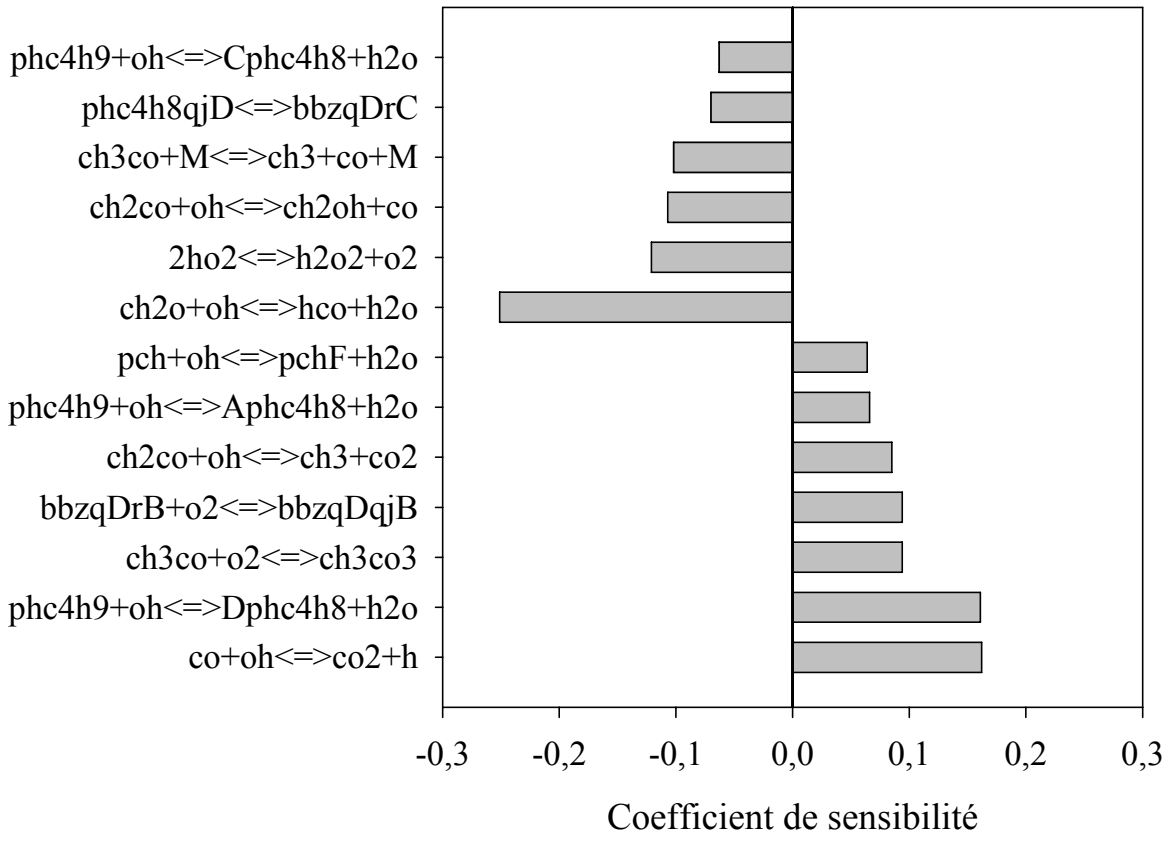


Figure V.4: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1 en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=0,5, P=10 atm)

Les réactions ayant un coefficient de sensibilité positif favorisent la formation de dioxyde de carbone CO_2, ce qui traduit aussi une conversion plus importante du carburant. Par contre, celles avec un coefficient de sensibilité négatif réduisent la formation de CO_2, ce qui traduit aussi une conversion moins importante du carburant. A basse température les réactions qui influent le plus la production de CO_2 sont et les réactions d'oxydation du monoxyde de carbone (co + oh ⇌ co2 + h, avec un coefficient de sensibilité S = 0,162) et les réactions de métathèse entre le butylbenzène et le radical hydroxyle pour former des radicaux phénylbutyles (1-phényl-4-butyle et 1-phényl-1-butyle) et de l'eau (phc4h9 + oh ⇌ Dphc4h8 + h_2o, avec un coefficient S = 0,161 et phc4h9 + oh ⇌ Aphc4h8 + h_2o). Les réactions de métathèse entre le propylcyclohexane et le radical OH pour former de l'eau et des radicaux propylcyclohexyles (pch + oh ⇌ pchF + h_2o) sont aussi influentes. La réaction d'addition

d'oxygène sur ch3co (ch3co + o2 ⇌ ch3co3) joue également un rôle dans la formation de CO_2 avec un coefficient S = 0,094.

La réaction de métathèse entre le formaldéhyde et le radical OH (ch2o + oh ⇌ hco + h2o) inhibe fortement la formation de CO_2 avec un coefficient S = -0,251. D'autres réactions telles que les réactions de dismutation des radicaux hydroperoxyles, 2ho2 ⇌ h2o2 + o2, avec un coefficient S = -0,121, ou encore les réactions : ch2co + oh ⇌ ch2oh + co (avec S = -0.107) et ch3co + M ⇌ ch3 + co + M (avec S = -0.102) ont un effet négatif sur la production de dioxyde de carbone. En effet le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 formé n'est pas réactif (stable thermiquement) dans la zone de coefficient négatif de température ; sa formation correspond à une rupture de chaîne, entraînant une diminution de réactivité du système, et aussi de la production de CO_2. La réaction ch2co + oh ⇌ ch2oh + co entre en concurrence avec la réaction ch2co + oh ⇌ ch3 + co2 (avec un coefficient de sensibilité positif S = 0,085). Par ailleurs l'espèce ch2oh produite pourra par la suite former du formaldéhyde.

La Figure V.5 présente les coefficients de sensibilités des réactions les plus influentes sur la modélisation des concentrations de dioxyde de carbone.

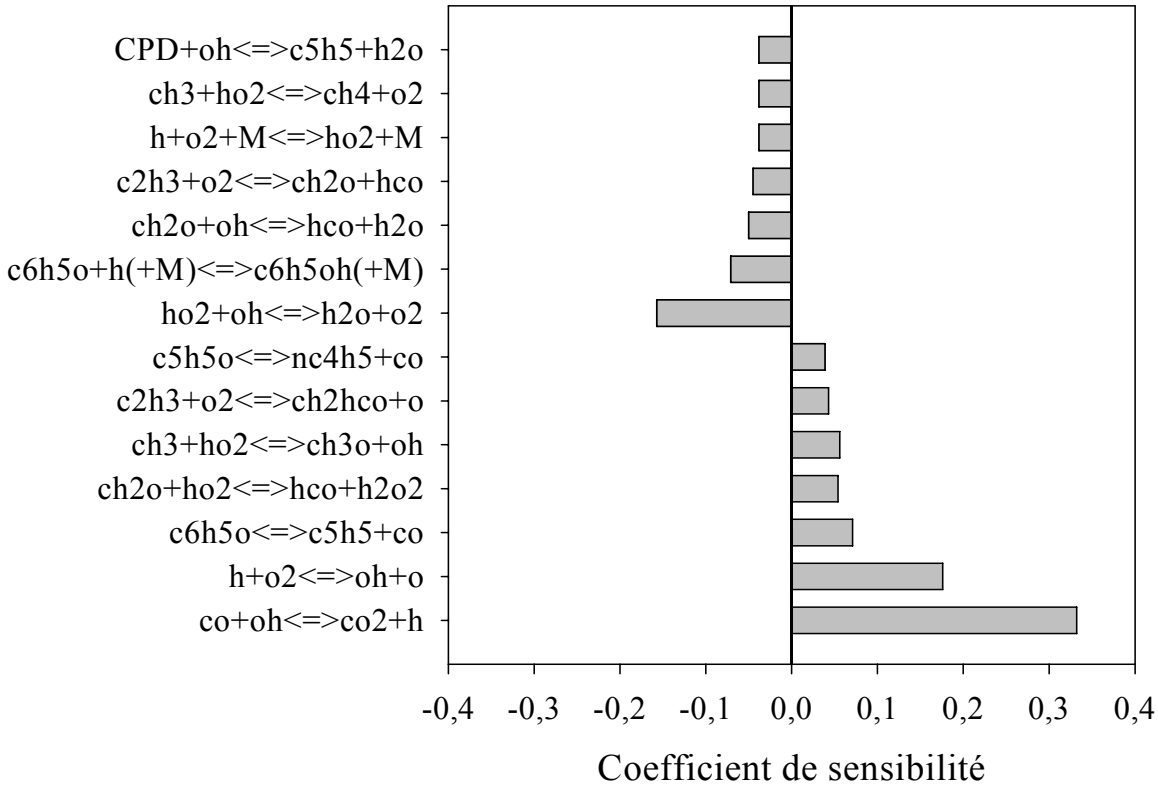


Figure V.5: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1 en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=0,5, P=10 atm)

La formation de CO_2 à haute température est principalement sensible à la cinétique d'oxydation du monoxyde de carbone par OH (co + oh ⇌ co2 + h, avec un coefficient de sensibilité S = 0,332) et la réaction de ramification principale (h + o2 ⇌ oh +o, avec S = 0,176). Cette dernière réaction favorise la production de CO_2 du fait de la formation du radical OH. A cette température (T=1030 K) la conversion de CO en CO_2 a déjà lieu.

La réaction la plus importante qui inhibe la formation de CO_2 est la réaction ho2 + oh ⇌ h2o +o2, avec un coefficient S = -0,157. La réaction d'addition h + o2 + M ⇌ ho2 + M influe aussi sur la formation du CO_2. En effet la réaction d'addition forme le radical hydroperoxyle HO_2 (moins réactif que le radical OH) au lieu de former le radical OH nécessaire à la formation de dioxyde de carbone.

5.2 Étude cinétique de l'oxydation des hydrocarbures lourds de substitutions

5.2.1 Oxydation du n-undécane et validation du modèle

L'oxydation du n-undécane n'a pas été étudiée antérieurement. Nous avons donc étudié son oxydation en réacteur auto-agité par jets gazeux et développé un sous-mécanisme cinétique chimique qui sera validé par confrontation avec les résultats expérimentaux.

5.2.1.1 Conditions expérimentales

Une étude expérimentale de l'oxydation du n-undécane (M=156,31 $g.mol^{-1}$; ρ=0 ,74 $g.cm^{-3}$) a été effectuée en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) entre 550 et 1150 K, à haute pression (10 atm) et à trois différentes richesses (0,5, 1 et 2). Le temps de passage a été maintenu constant (τ=1 s) pendant nos expériences.

Le Tableau V.2 résume les conditions expérimentales choisies pour l'oxydation du n-undécane $C_{11}H_{24}$ en réacteur auto-agité dans notre travail.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{undécane}$	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$3,400.10^{-2}$	$9,650.10^{-1}$	0,5
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,700.10^{-2}$	$9,820.10^{-1}$	1
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$8,500.10^{-3}$	$9,905.10^{-1}$	2

Tableau V.2 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du n-undécane en JSR

5.2.1.2 Résultats expérimentaux

Les profils de concentrations des réactifs, espèces intermédiaires stables et produits issus de l'oxydation du n-undécane ont été mesurés en fonction de la température et pour trois richesses. Nous avons alors pu étudier l'évolution des espèces stables mises en jeu lors de la

combustion (Figures V.6 à V.8). Les espèces identifiées sont globalement similaires à celles détectées lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1. Néanmoins le undécane étant un simple hydrocarbure et non un mélange d'hydrocarbures, nos moyens d'analyse nous ont permis de mieux identifier certaines espèces.

Parmi les espèces majoritaires formées on observe les espèces oxygénées telles que le CO, le CO_2, l'eau, le formaldéhyde (CH_2O) et d'hydrogène ainsi que des hydrocarbures imbrûlés dont l'éthylène (C_2H_4) et le méthane (CH_4). On remarque également une production moyennement élevée de propène (C_3H_6), d'acétaldéhyde CH_3CHO et de méthanol (CH_3OH). Dans le domaine de haute température l'éthylène est l'hydrocarbure imbrûlé majoritaire produit. Le CO reste l'espèce oxygénée principale formée suivi du formaldéhyde. D'autres espèces avec des concentrations plus faibles ont aussi été détectées. On y trouve l'éthane (C_2H_6), les alcènes légers (but-1-ène 1-C_4H_8, et le buta-1,3-diène 1,3-C_4H_6), alcènes lourds allant du pent-1-ène (1-C_5H_{10}) jusqu'au non-1-ène (1-C_9H_{18}), l'acétylène (C_2H_2), certains aldéhydes tels que le propanal (C_2H_5CHO), le butanal (C_3H_7CHO), le pentanal (C_4H_9CHO), l'hexanal ($C_5H_{11}CHO$) ainsi que le benzène (C_6H_6). Nous avons également identifié des éthers cycliques (2-butyl-5-propyltetrahydrofurane, 2-ethyl-5-pentyltetrahydrofurane, 2-methyl-5-heptyltetrahydrofurane et 2-heptyltetrahydrofurane) et des cétones (acétone, butanone et pentanone) avec des fractions molaires négligeables.

Le undécane est très réactif à basse température. En effet on observe une consommation rapide de l'hydrocarbure initial à basse température entre 560 et 670 K. On remarque également une baisse de la réactivité entre 670 et 730 K. C'est la zone de coefficient négatif de température, où on observe une diminution de la formation de CO et de CO_2. Cette région est plus visible sur les profils du combustible en milieu stœchiométrique et riche ainsi que sur les profils de CO (Φ=0,5 ; 1 et 2), de CO_2 (Φ=0,5 et 2) et de CH_2O (Φ=1 et 2). Le CNT est plus intense en milieu riche. L'hydrocarbure va subir une nouvelle consommation pour des températures supérieures à 730 K.

5.2.1.3 Confrontation expérience-modèle

Dans le but de valider le modèle cinétique développé pour l'oxydation des hydrocarbures lourds, nous avons comparé les résultats expérimentaux obtenus en réacteur

auto-agité avec les profils d'espèces simulées avec le mécanisme développé ici. La confrontation expérience-modèle est présentée sur les figures ci-dessous.

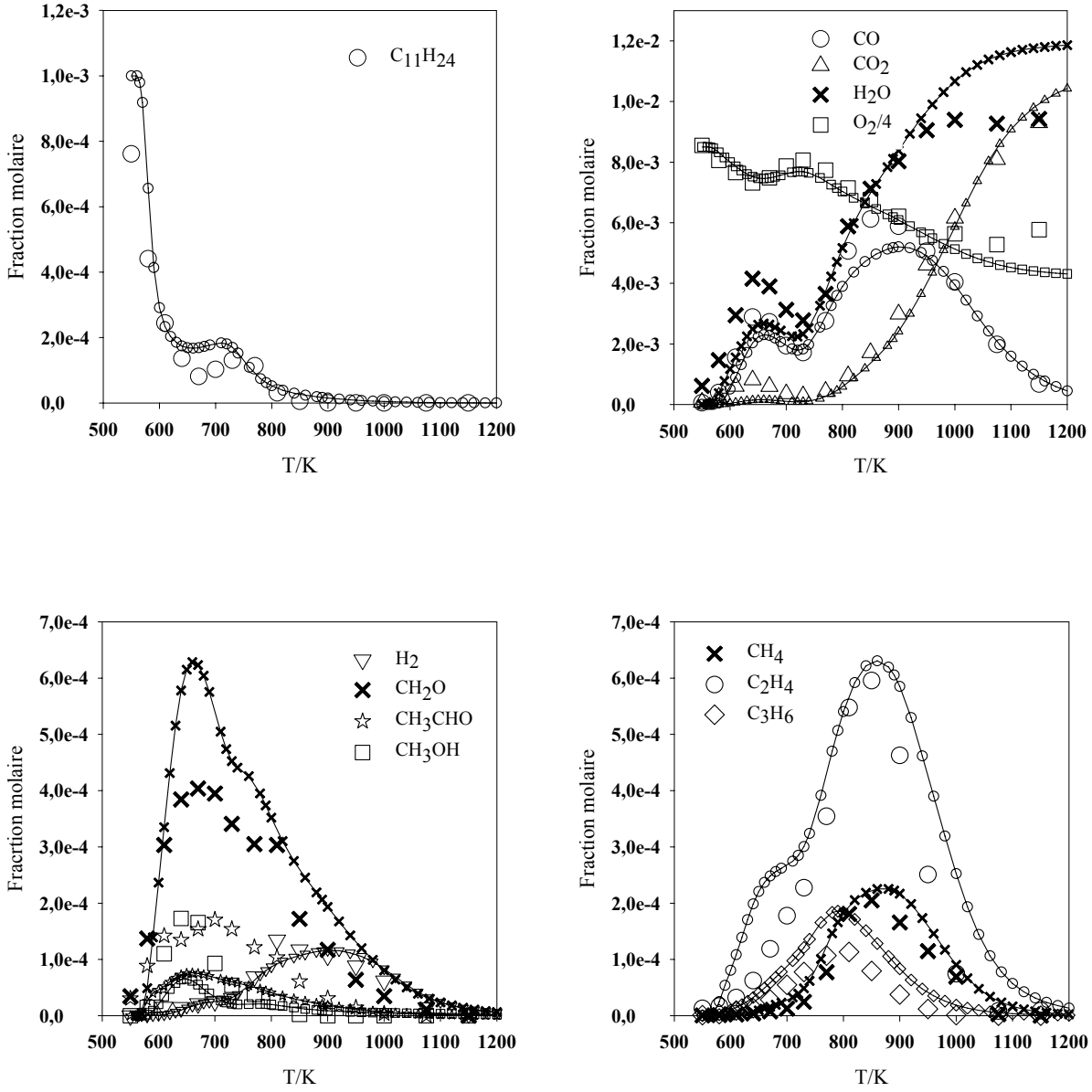


Figure V.6: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,4% ; X_{N2}=96,5%

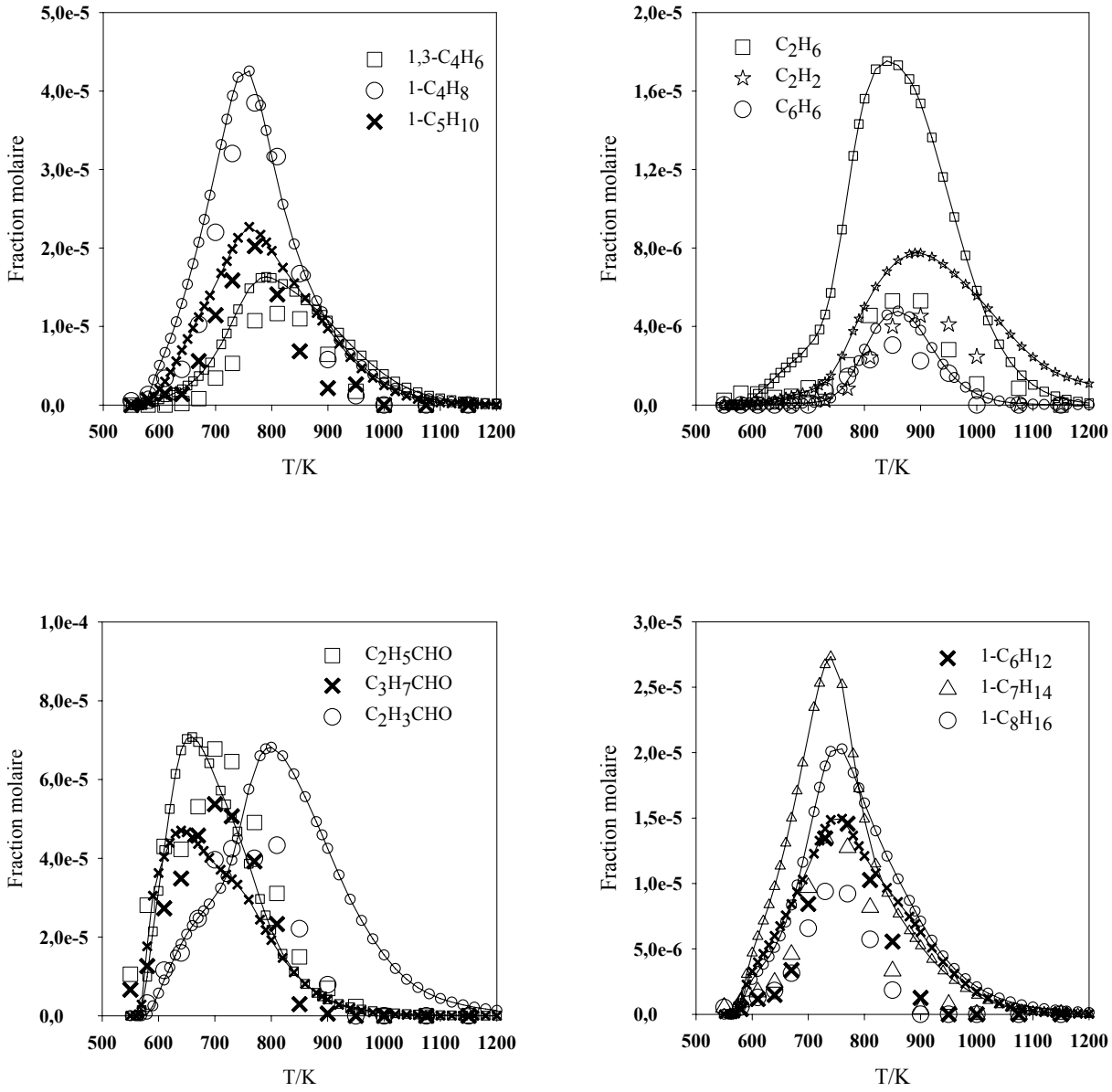


Figure V.6: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité : P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,4% ; X_{N2}=96,5%

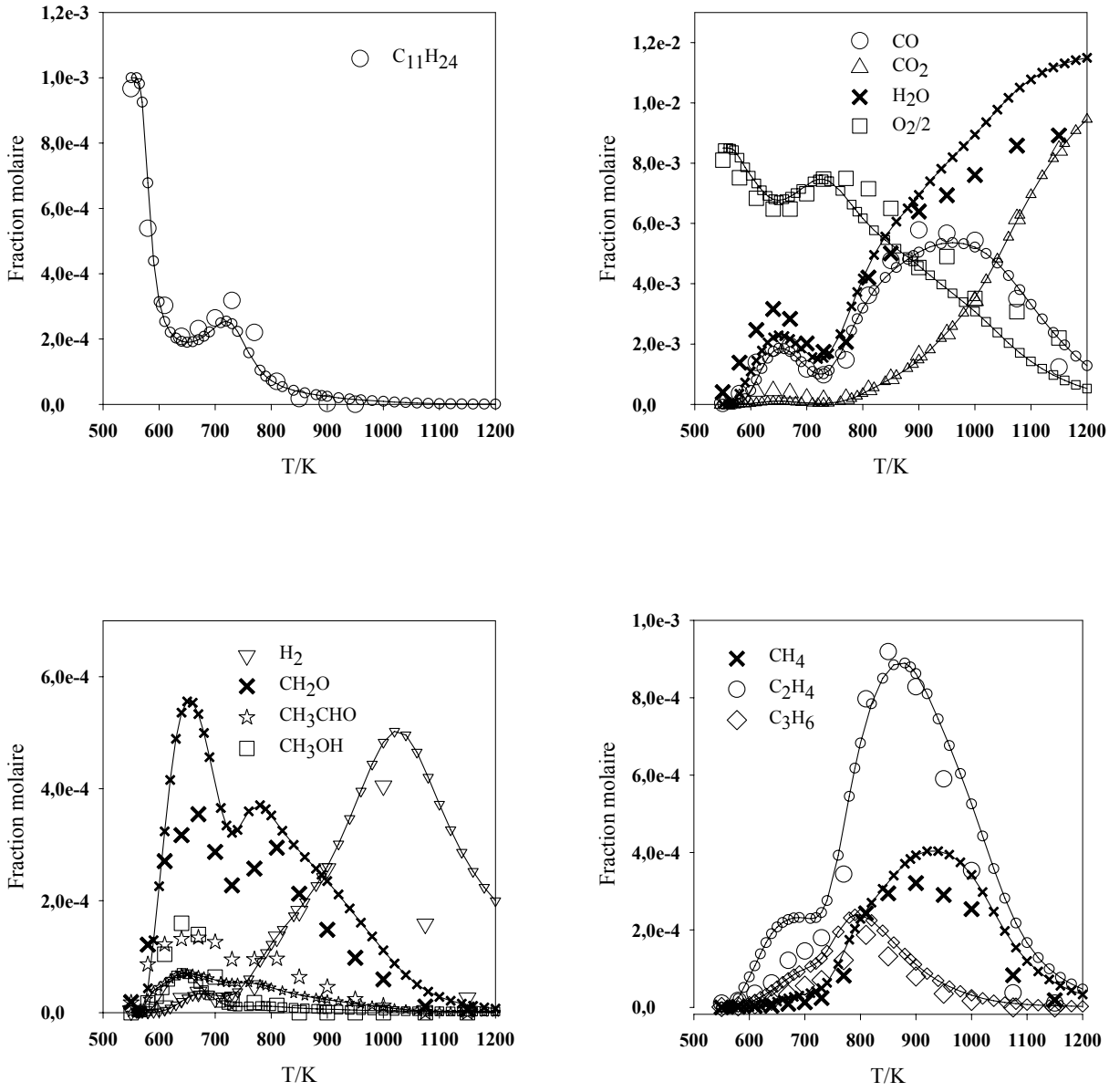


Figure V.7: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,2%

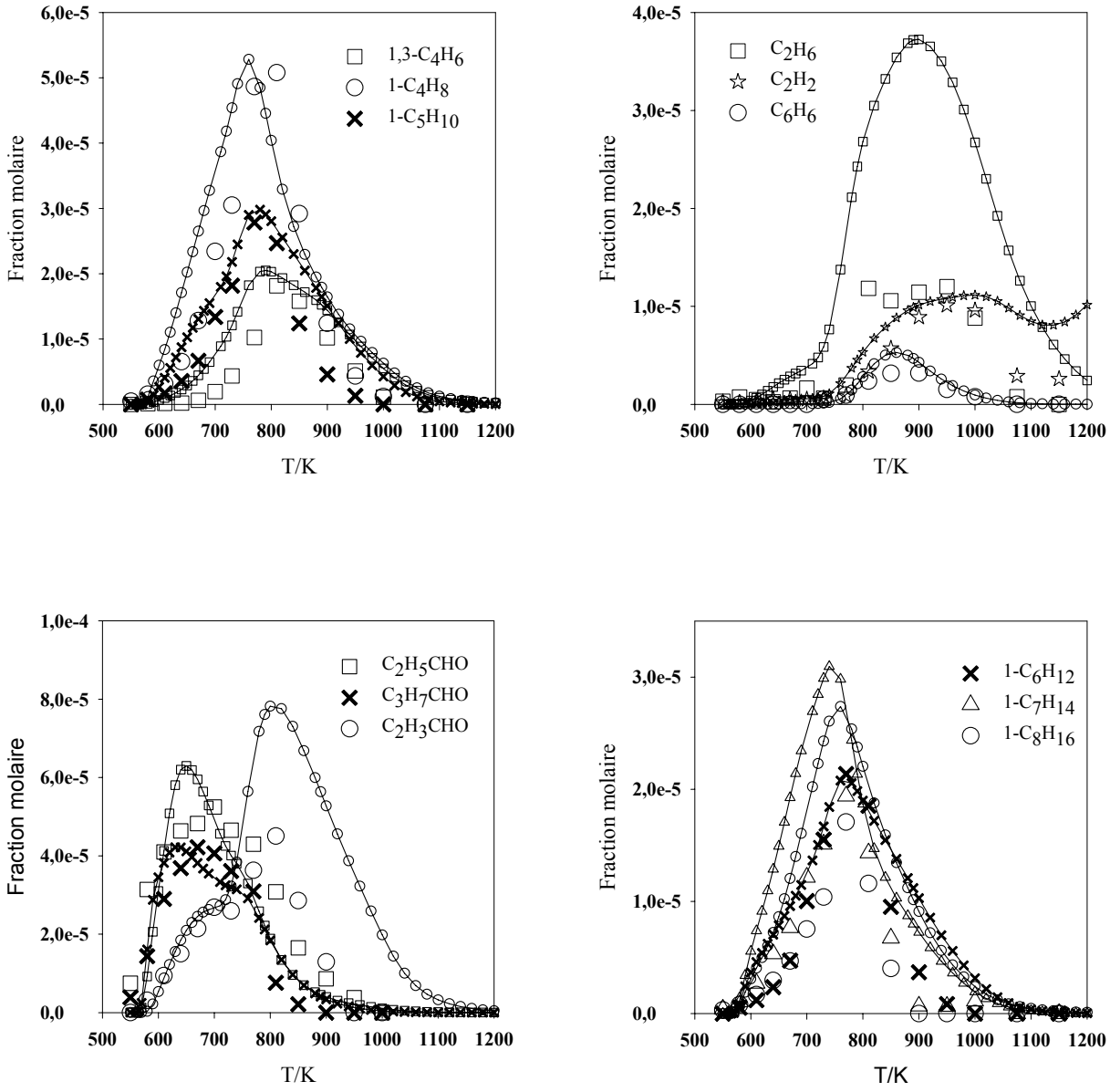


Figure V.7: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,2%

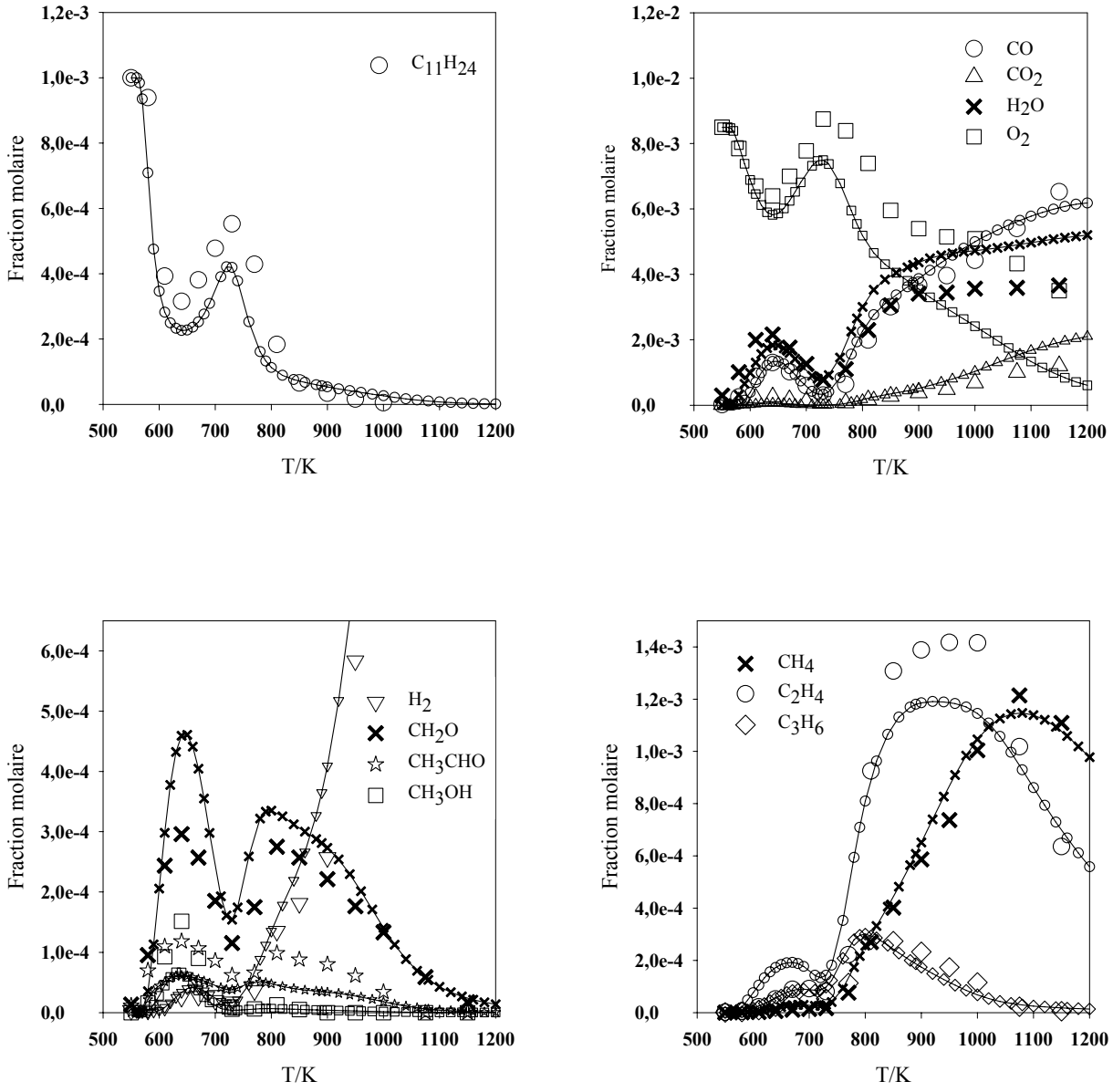


Figure V.8: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,85% ; X_{N2}=99,05%

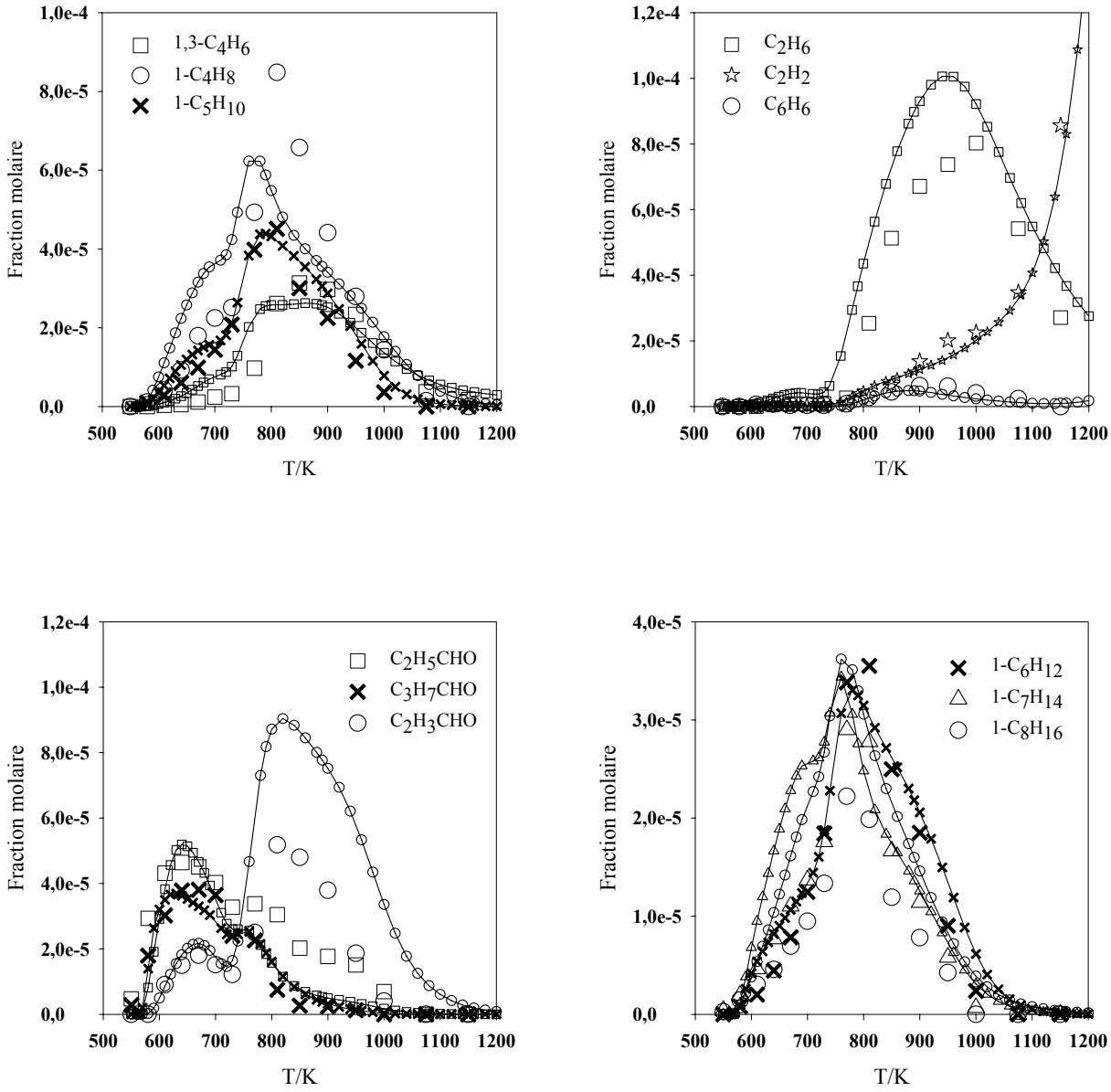


Figure V.8: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,85% ; X_{N2}=99,05%

On observe un accord acceptable entre le modèle et l'expérience pour les principales espèces (réactifs, espèces intermédiaires stables et produits finals) issues de l'oxydation du n-undécane. En milieu pauvre le profil du undécane est surestimé dans la zone du CNT. Le modèle représente correctement le profil de l'hydrocarbure initial à la stœchiométrie. La flamme froide et le domaine de haute température sont bien reproduits. Pour une richesse de 2, les concentrations de undécane dans la zone de CNT sont sous-estimées. On remarque un accord satisfaisant entre le modèle et l'expérience pour CO, CO_2, l'oxygène (à Φ=0,5), le

méthane, le propène et l'éthylène (à Φ=0,5 et 1). Les quantités d'éthane sont largement surestimées. Les fractions molaires d'acétylène sont globalement bien reproduites par le modèle. Tout comme dans les expériences, la concentration maximale de formaldéhyde est atteinte à basse température à T ≈ 640 K et à haute température pour des températures voisines de 800 K. On note un accord convenable entre les résultats du modèle et des expériences au niveau de la forme du profil de CH_2O. Toutefois le formaldéhyde est surestimé à basse et haute température pour les trois richesses. L'acétaldéhyde est sous-estimé dans toute la gamme de température. On observe un accord convenable entre l'expérience et le modèle pour les concentrations de butanal. Le modèle simule décemment les profils du pent-1-ène et du hex-1-ène. Cependant les quantités de oct-1-ène sont surestimées.

5.2.1.4 Analyse de sensibilité

La confrontation expérience-modèle nous a permis de valider le mécanisme cinétique chimique développé pour l'oxydation du n-undécane. En milieu stœchiométrique le profil du n-undécane est parfaitement reproduit par le modèle. Nous avons donc effectué des analyses de sensibilités à une richesse de 1 et à haute pression (10 atm) dans le but de déterminer les réactions auxquelles la consommation du combustible est la plus sensible.

La première analyse a été effectuée à basse température, à (T = 650 K). Les résultats des analyses de sensibilité sont présentés sur la Figure V.9.

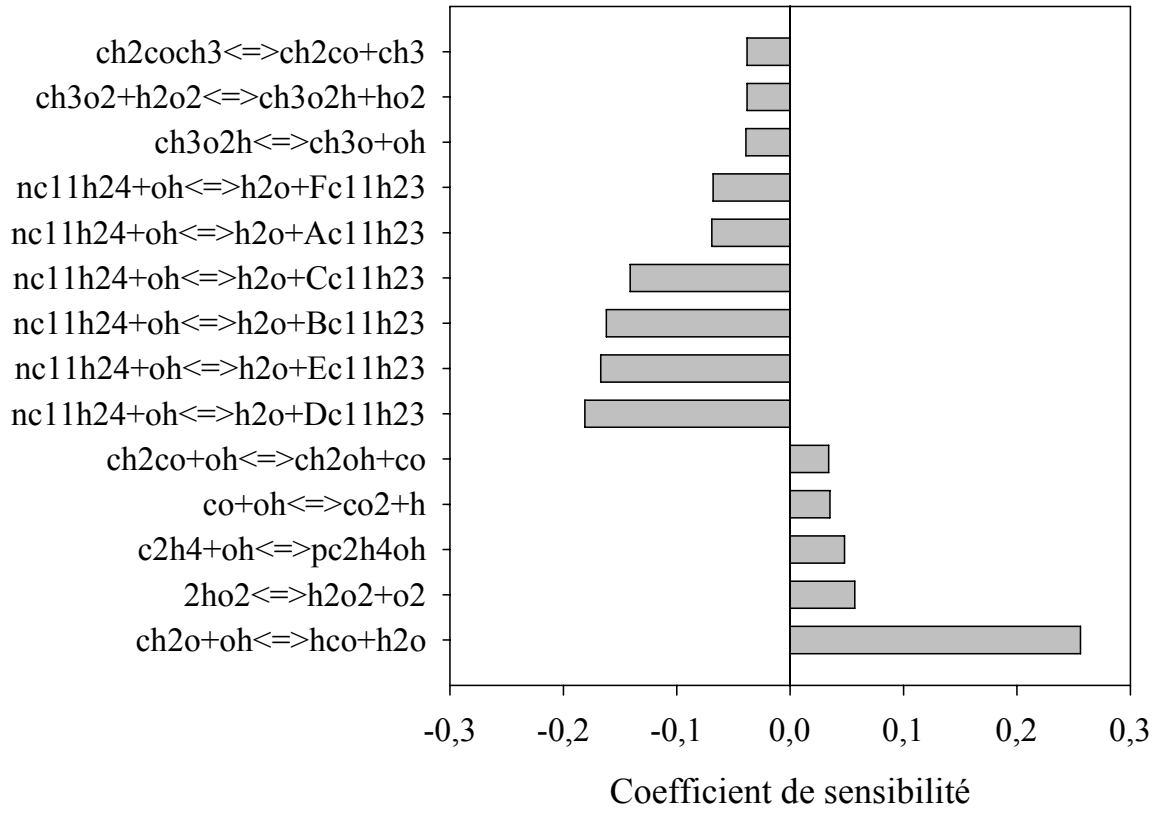


Figure V.9: Spectre de sensibilité du n-undécane lors l'oxydation du undécane en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=1, P=10 atm)

La réaction de métathèse ch2o + oh ⇌ hco + h2o a le coefficient de sensibilité positif le plus élevé avec S = 0,265. Cette réaction ralentit la consommation du undécane à basse température car elle consomme les radicaux OH. D'autres réactions moins importantes telles que la réaction de dismutation des radicaux hydroperoxyles (2ho2 ⇌ h2o2 + o2, avec un coefficient S = 0.057) et des réactions consommant des radicaux hydroxyles OH (c2h4 + oh ⇌ pc2h4oh ; co + oh ⇌ co2 + h) entraînent eux aussi la baisse de la consommation de l'hydrocarbure. En effet le peroxyde d'hydrogène formé est stable à cette température.

Les réactions de métathèse entre l'hydrocarbure et les radicaux OH ont une très grande influence sur le combustible. Elles accélèrent la consommation du undécane et augmentent donc la réactivité globale du système. La réaction qui favorise le plus la consommation de l'hydrocarbure initiale est la réaction d'arrachement d'un atome d'hydrogène porté par

l'atome de carbone 'D' par le radical OH pour former de l'eau et le radical 4-undécyle (nc11h24 + oh ⇌ h2o + Dc11h23, avec un coefficient de sensibilité S = -0,181).

La seconde analyse de sensibilité a été effectuée à haute température, à (T = 1030 K). Les résultats des réactions sont présentés sur la figure ci-dessous pour les réactions les plus sensibles.

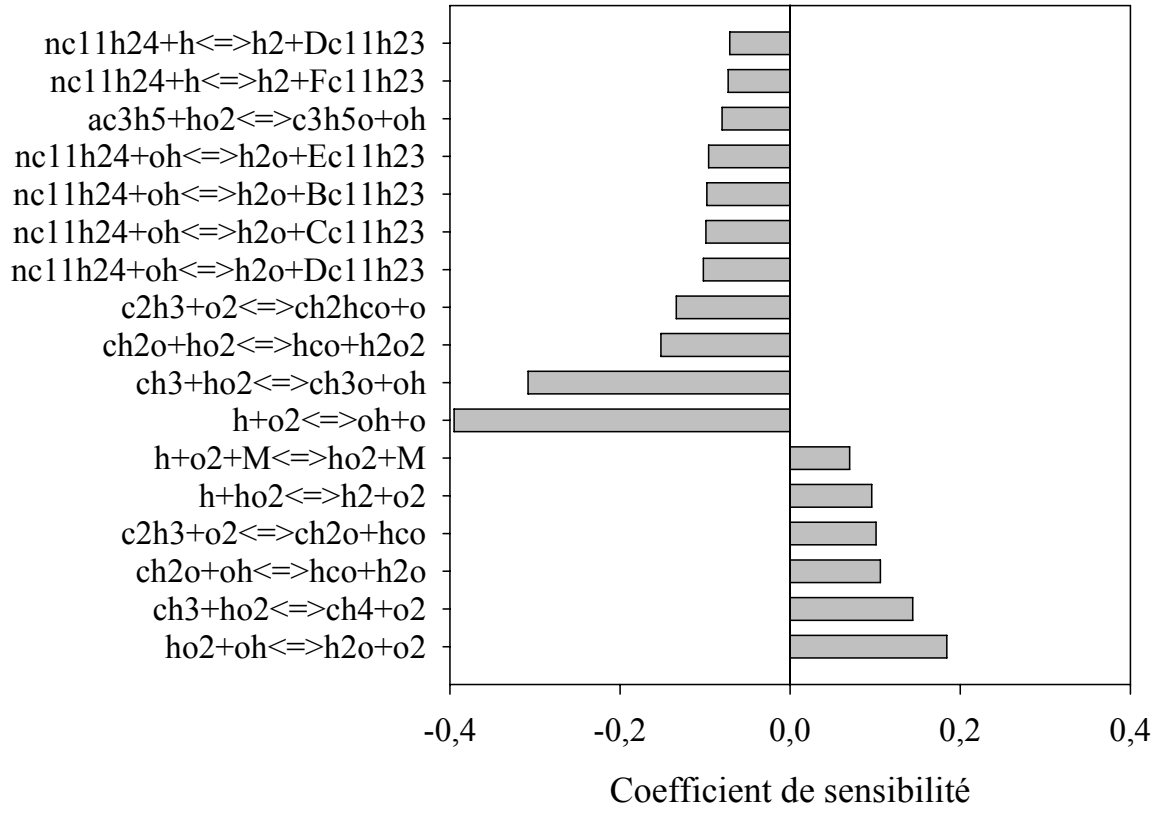


Figure V.10: Spectre de sensibilité du undécane lors l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=1, P=10 atm)

La réaction ho2 + oh ⇌ h2o + o2 (S = 0,184) est celle qui contribue le plus au ralentissement de la consommation de l'hydrocarbure. Cette réaction ainsi que la réaction ch2o + oh ⇌ hco + h2o (S = 0,106) consomment les radicaux OH nécessaires à l'oxydation de l'hydrocarbure et la formation des produits finals. La réaction menant à la formation du radical hydroperoxyle HO_2, peu réactif, joue également un rôle négatif sur la vitesse de consommation du undécane. La réaction de ramification h + o2 ⇌ oh + o est la plus influente

(avec un coefficient de sensibilité S = -0,395) car elle favorise la production de radicaux hydroxyles OH nécessaire à la consommation de l'hydrocarbure initial et la formation des produits finals. Il en est de même pour la réaction ch3 + ho2 ⇌ ch3o + oh, avec S = -0,308. Une autre réaction à laquelle la consommation du undécane est sensible est celle entre les radicaux vinyles et l'oxygène c2h3 + o2 ⇌ ch2hco + o, S = -0,134. Cette réaction concurrence la réaction c2h3 + o2 ⇌ ch2o + hco, avec S = 0,101. On trouve également parmi les réactions sensibles, celles directement liées au combustible telles que les réactions de métathèse avec les radicaux OH et H (nc11h24 + oh ⇌ h2o + Dc11h23, S = -0,102 ; nc11h24 + oh ⇌ h2o + Cc11h23, S = -0,099 ; nc11h24 + oh ⇌ h2o + Bc11h23, S = -0,098 ; nc11h24 + h ⇌ h2 + Fc11h23, S = -0,073 et nc11h24 + h ⇌ h2 + Dc11h23, S = -0,071).

5.2.1.5 Analyse de voies réactionnelles

Nous avons aussi effectué une analyse de vitesse afin d'identifier les réactions responsables de la consommation de l'hydrocarbure initial et de la formation des produits. L'étude a été menée lors l'oxydation du undécane à basse et haute température en milieu stœchiométrique et à haute pression (P=10 atm).

La première analyse de vitesse a été effectuée à basse température (T = 650 K). Les principales voies réactionnelles sont indiquées sur la Figure V.11. A cette température le undécane réagit principalement avec les radicaux hydroxyles OH par des réactions de métathèses pour former des radicaux undécyles. Les radicaux majoritairement formés lors de cette étape sont les 2-, 3-, 4- et 5-undécyles. On observe deux voies de dégradation des radicaux undécyles. La voie majoritaire est l'étape de péroxydation des radicaux undécyles pour former des radicaux peroxyundécyles ($C_{11}H_{23}O_2$). Dans le cas du 1-undécyle, on observe une autre voie conduisant à la formation d'un autre radical undécyle (5-undécyle) par une réaction d'isomérisation. Les radicaux peroxyundécyles formés vont par la suite s'isomériser pour produire des radicaux hydroperoxyundécyles. Ces derniers vont s'additionner à l'oxygène pour former des radicaux hydroperoxyperoxyundécyles ou bien ils seront décomposés soit en éthers cycliques soit en alcènes et aldéhydes par rupture de liaison C-C. Les radicaux hydroperoxyperoxyundécyles vont à leur tour se décomposer pour former des cétohydroperoxydes.

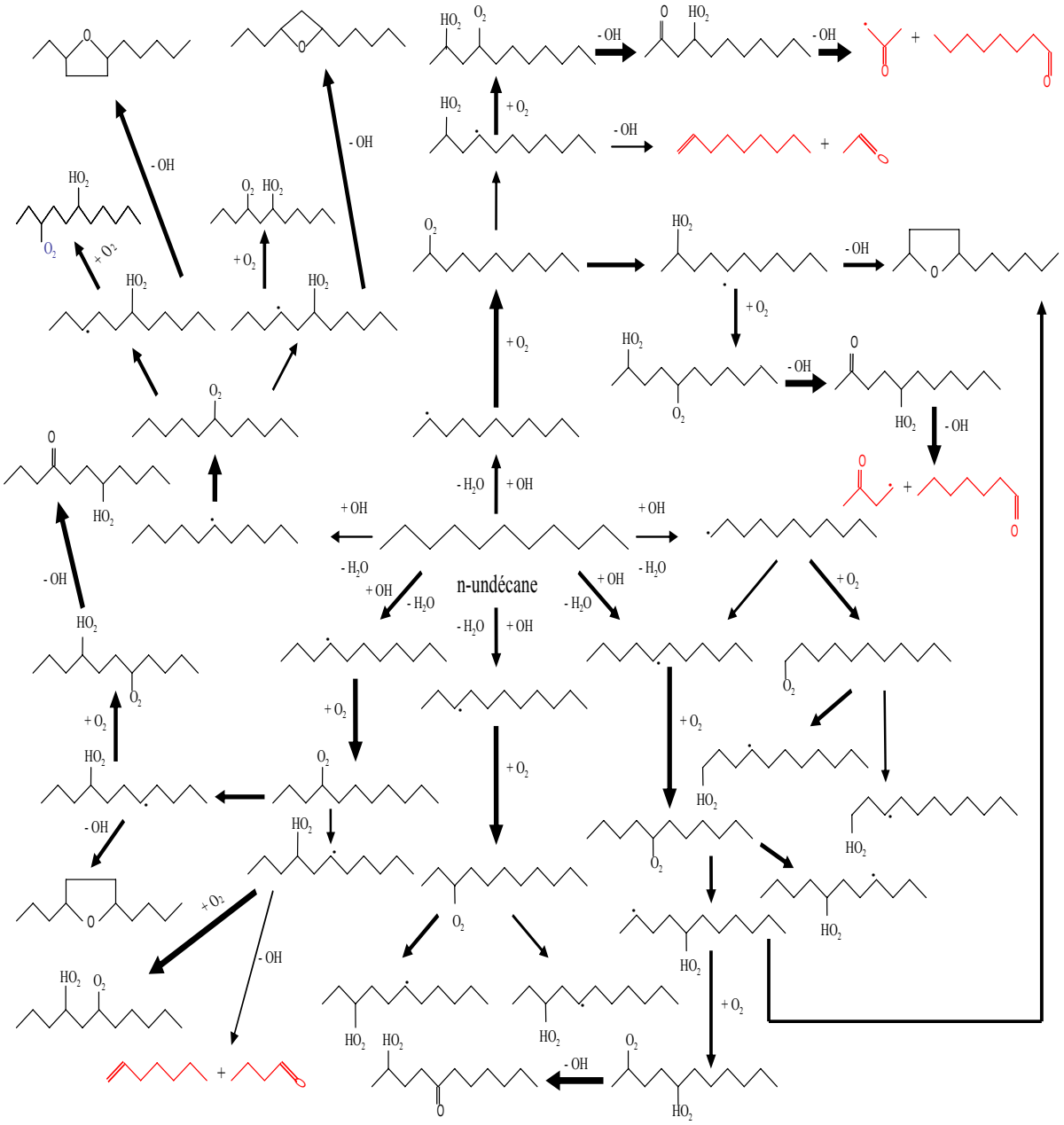


Figure V.11 : Voies réactionnelles principales du n-undécane lors de son l'oxydation en réacteur auto-agité à Φ=1, T=650 K (P=10 atm, τ=1 s)

La deuxième analyse de vitesse a été effectuée à haute température (T = 1030 K). Le schéma de dégradation du n-undécane est illustré sur la figure suivante.

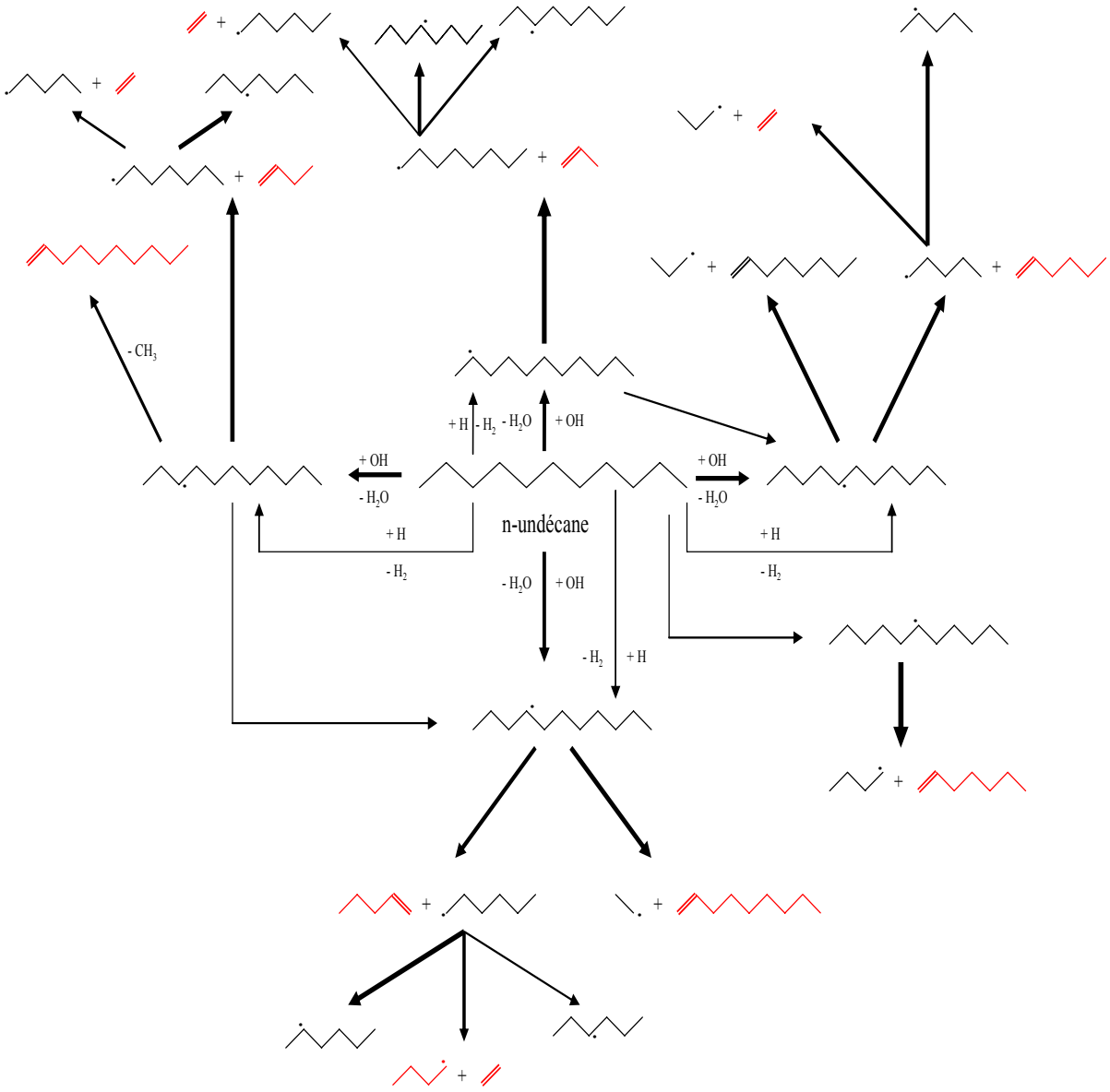


Figure V.12 : Voies réactionnelles du n-undécane lors de son oxydation en réacteur auto-agité à Φ=1, T=1030 K (P=10 atm, τ=1 s)

Le schéma ci-dessus confirme bien qu'à haute température ce sont les réactions de rupture de liaisons qui prédominent. L'hydrocarbure initial va dans un premier temps se dégrader essentiellement via des réactions de métathèse avec les radicaux OH et H pour former des radicaux undécyles. Dans le cas du 2-undécyle, on observe deux voies principales de dégradation. En effet le 2-undécyle va majoritairement subir une rupture de liaison C-C pour former le propène (C_3H_6) et un radical 1-alkyle. La deuxième voie minoritaire permet la formation d'un autre radical undécyle (5-undécyle) par une réaction d'isomérisation. Dans d'autres cas une autre voie menant à la formation de radicaux alkyles et d'alcènes est possible (par exemple le 4-undécyle forme du 1-nonène et un radical C_2H_5). Les espèces en couleurs ont été identifiées lors des analyses par IRTF ou CPG.

5.2.2 Oxydation du n-dodécane et validation du modèle

Dans cette section, nous exposons les résultats obtenus pour l'oxydation du n-dodécane. On y trouve une partie expérimentale effectuée en réacteur auto-agité par jets gazeux et une partie modélisation. Les résultats expérimentaux sont comparés à ceux issus de la simulation.

5.2.2.1 Conditions expérimentales

La cinétique d'oxydation du dodécane (M=170,34 g.mol^{-1} ; ρ=0 ,75 g.cm^{-3}) a été étudiée en réacteur auto-agité entre 560 et 1030 K, à haute pression (10 atm), à différentes richesses (Φ = 0,5, 1 et 2) et à un temps de passage (τ=1 s). Les conditions expérimentales de cette étude de l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité sont résumées dans le Tableau V.3.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{dodécane}$	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}700.10^{-2}$	$9{,}620.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}850.10^{-2}$	$9{,}805.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}250.10^{-3}$	$9{,}898.10^{-1}$	2

Tableau V.3 : Conditions expérimentales pour l'oxydation du n-dodécane en JSR

5.2.2.2 Résultats expérimentaux

Les moyens d'analyse disponibles nous ont permis l'identification d'une trentaine d'espèces durant l'oxydation du n-dodécane. Nous avons ainsi mesurés les concentrations des espèces suivantes : CO, CO_2, H_2O, CH_2O, H_2 C_2H_4, CH_4, C_3H_6, CH_3CHO, CH_3OH, C_2H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6, 1-C_5H_{10}, 1-C_6H_{12}, 1-C_7H_{14}, 1-C_8H_{16}, 1-C_9H_{18}, C_2H_2, C_6H_6, C_2H_5CHO, C_3H_7CHO, C_4H_9CHO, $C_5H_{11}CHO$. Nous avons également détecté quelques traces d'acétone, de butanone et de pentanone. Les profils de concentration d'espèces mesurés en fonction de la température pour Φ=0,5, 1 et 2 lors de l'oxydation du n-dodécane sont présentés sur les Figures V.13, 14 et 15.

Comme lors de l'oxydation du n-undécane, nous avons observé trois régimes d'oxydation bien distincts :

- le domaine de flamme froide
- la zone de coefficient négatif de température CNT
- le domaine de haute température

Le domaine de flamme froide se traduit par une consommation de l'hydrocarbure initial à des températures comprises entre 560 et 680 K. Une baisse de la réactivité est visible dans le domaine de basse température. Cette baisse se traduit par une diminution de la formation des produits de combustion CO et CO_2 entre 650 et 710 K (c'est la zone de CNT). Une deuxième accélération de la réactivité est visible à haute température (T>740) sur les profils du dodécane CO, CO_2 et H_2O.

5.2.2.3 Confrontation expérience-modèle

Dans cette section nous comparons nos données expérimentales et les résultats issus de nos modélisations. Globalement les résultats obtenus valident le mécanisme cinétique. En effet nous avons un bon accord entre les profils mesurés et simulés pour les principales espèces chimiques issues de l'oxydation du n-dodécane.

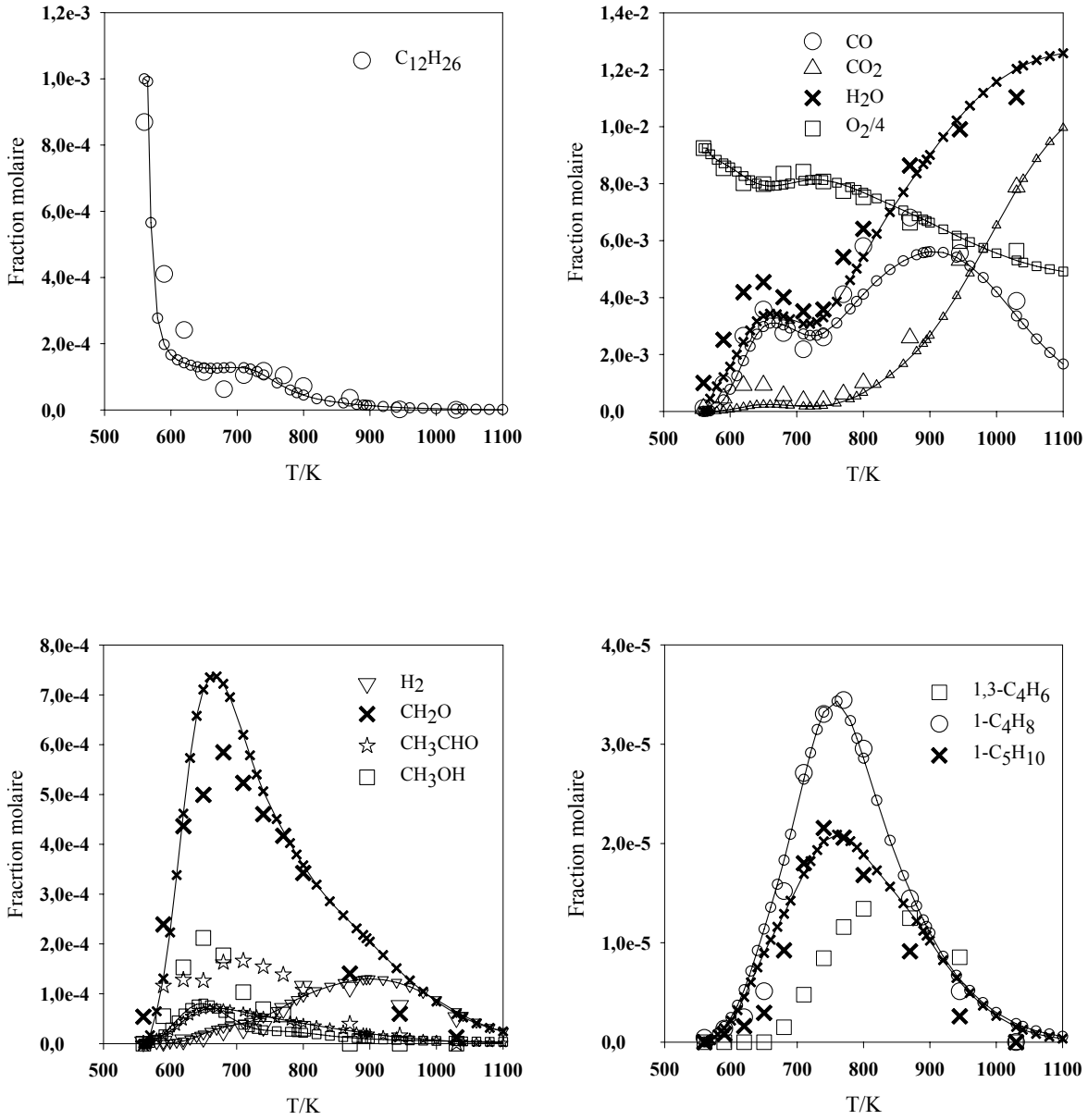


Figure V.13: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=3,70%; X_{N2}=96,20%

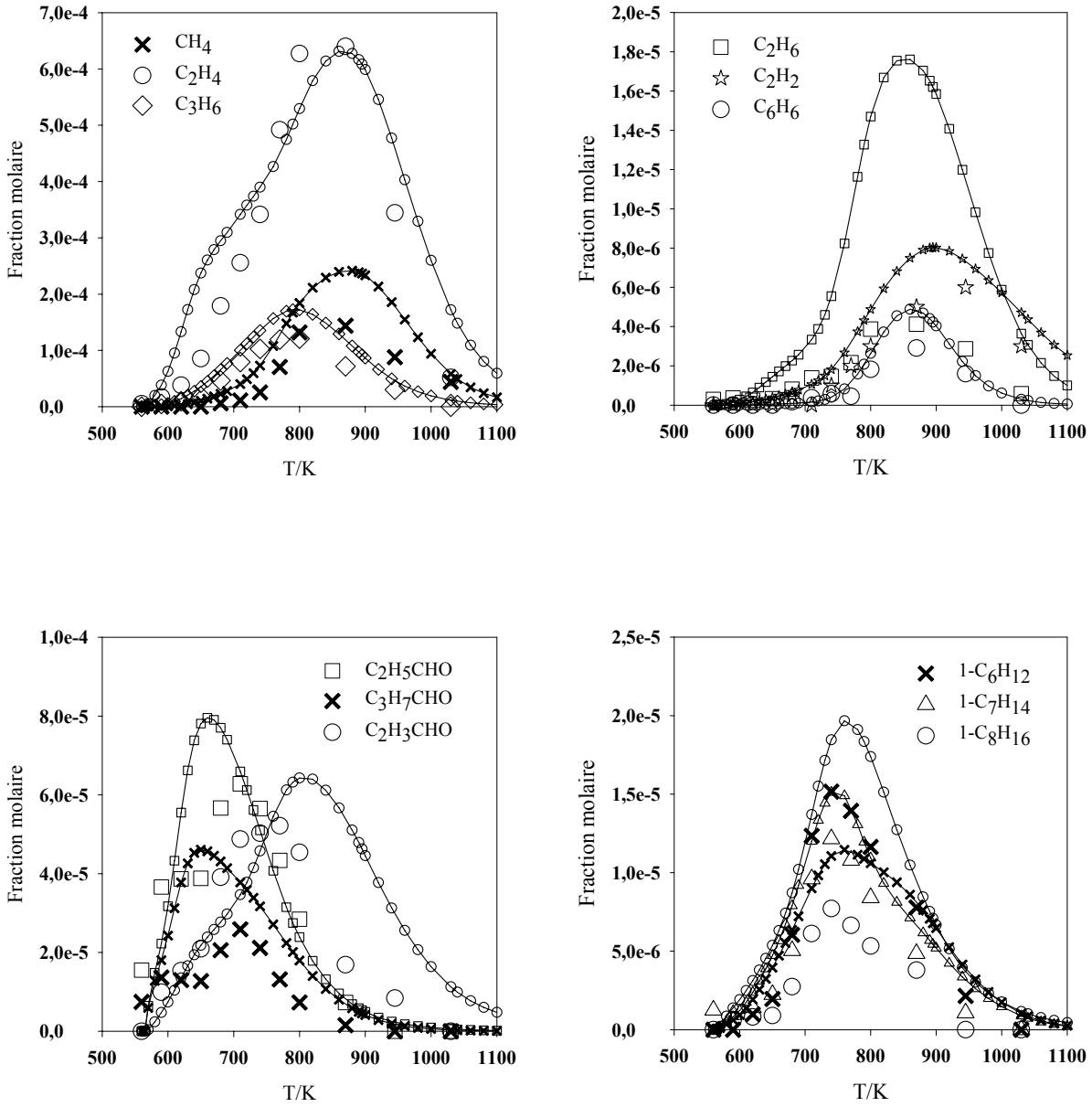


Figure V.13: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=3,70%; X_{N2}=96,20%

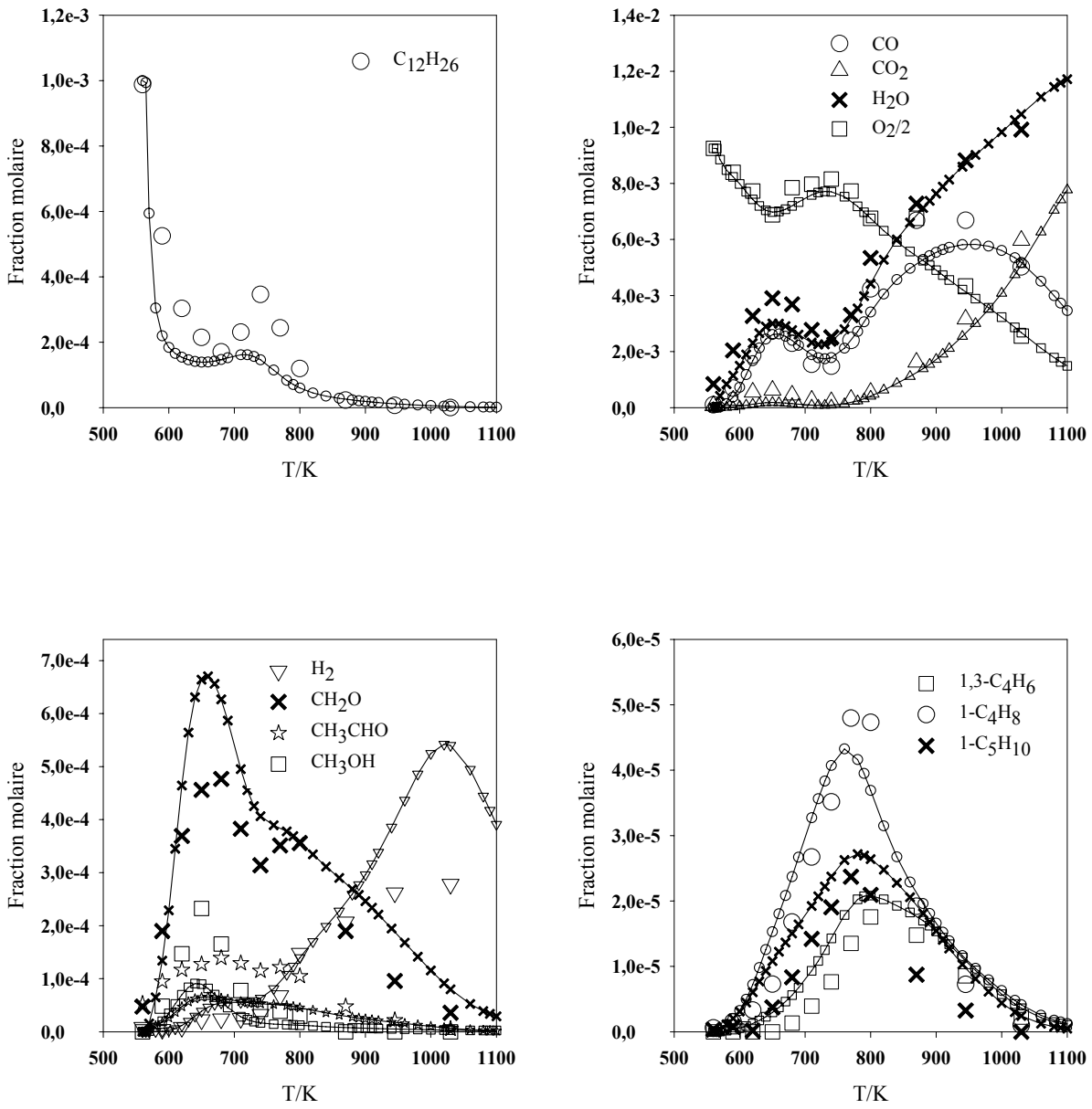


Figure V.14: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,85% ; X_{N2}=98,05%

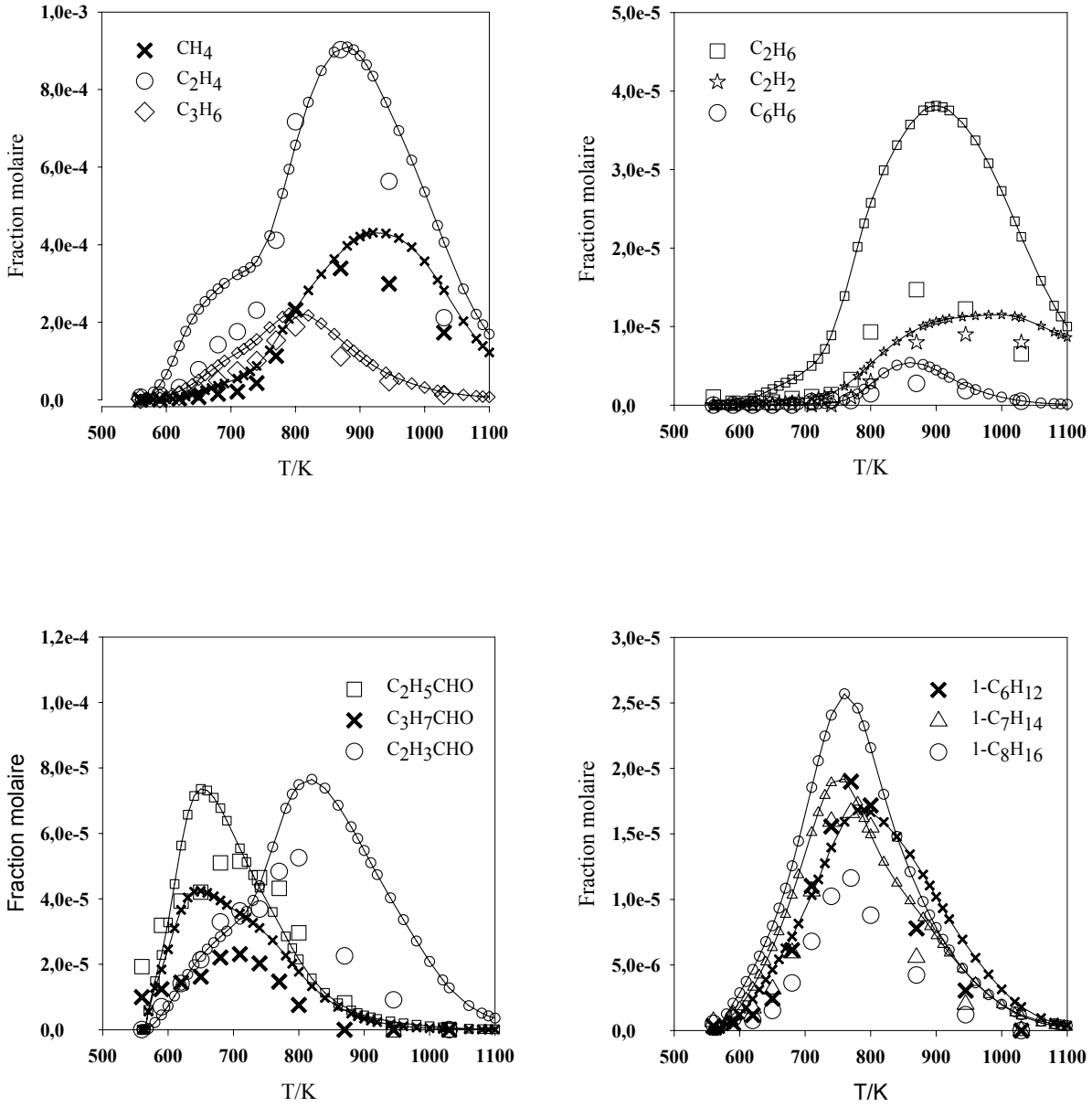


Figure V.14: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,85% ; X_{N2}=98,05%

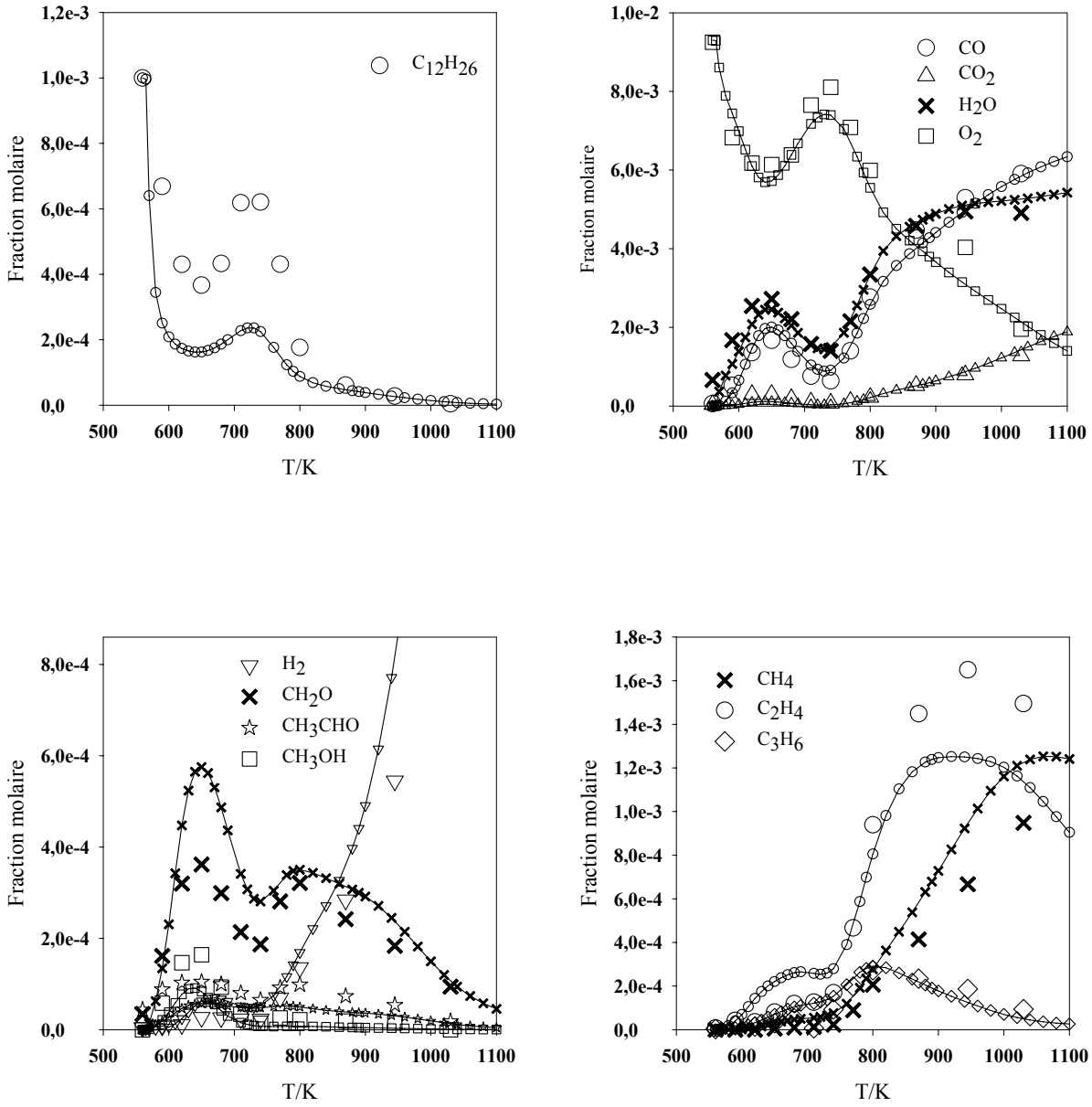


Figure V.15: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,93% ; X_{N2}=98,98%

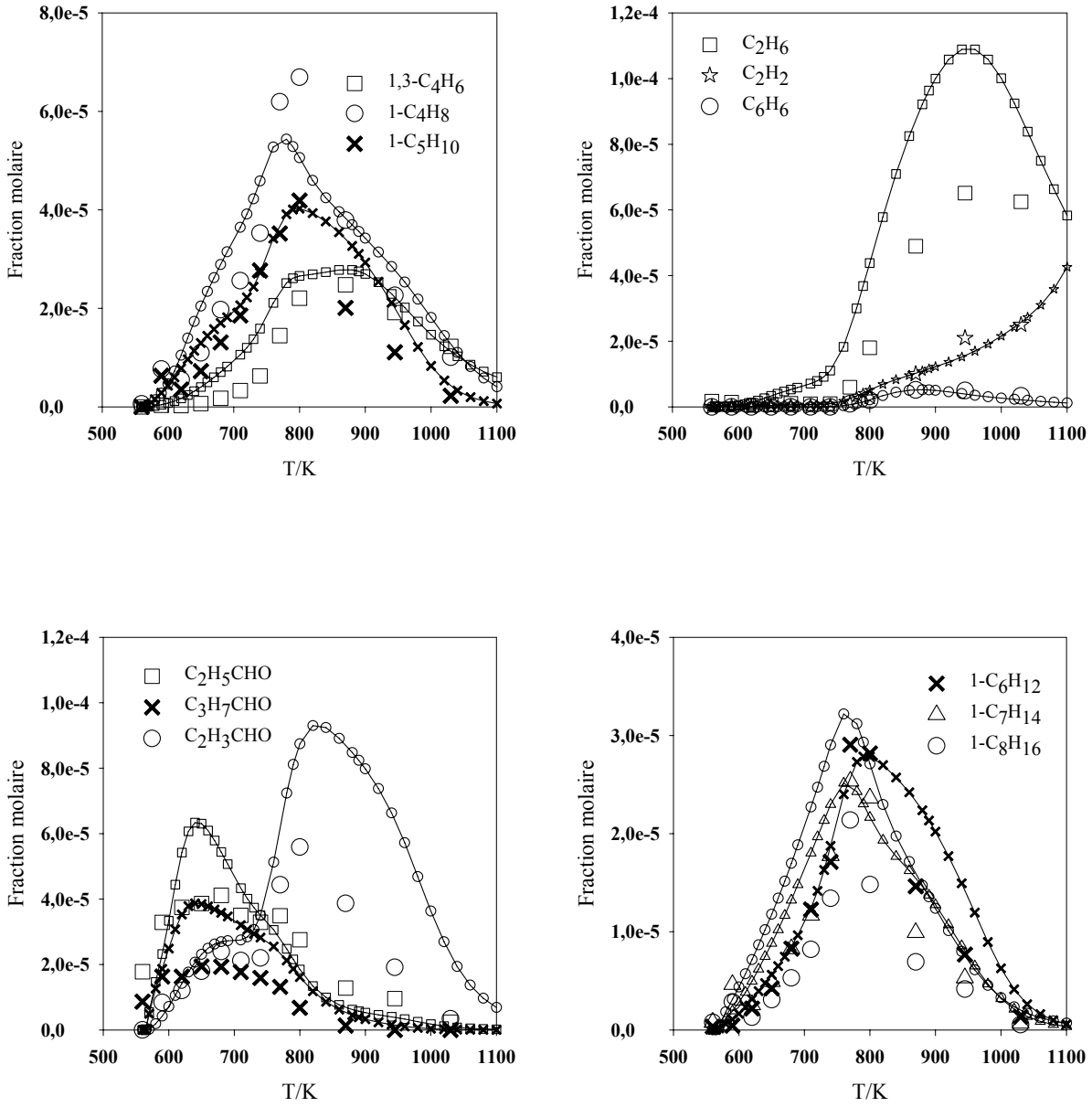


Figure V.15: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-dodécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,93% ; X_{N2}=98,98%

On observe les mêmes tendances que lors de la modélisation de l'oxydation du n-undécane. La vitesse de consommation du n-dodécane est surestimée par la modélisation à la stœchiométrie et en milieu riche. Le mécanisme cinétique reproduit convenablement les profils de concentrations de la majorité des espèces issues de l'oxydation du dodécane. On

observe également que la zone de coefficient négatif de température simulée est moins marquée que celle mesurée. Les profils mesurés et simulés montrent que le CNT augmente lorsque la concentration initiale d'oxygène diminue.

Les résultats obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation du dodécane sont conformes avec les résultats simulés par le mécanisme. En effet les principaux polluants et imbrûlés (CO, CO_2, CH_2O, C_6H_6, CH_4 et C_2H_4, 1,3-C_4H_6) formés pendant l'oxydation du dodécane sont bien simulés par le mécanisme. Cependant l'acétaldéhyde CH_3CHO (qui est un polluant toxique de l'air, TAP) est sous-estimé par le modèle dans tout le domaine de température compris entre 560 et 1030 K pour les trois richesses.

5.2.2.4 Analyse de sensibilité

Comme le mécanisme simule correctement les réactifs, espèces intermédiaires et principaux produits issus de l'oxydation du n-dodécane, nous avons effectué des analyses de sensibilités en milieu stœchiométrique et à haute pression afin de déterminer les réactions les plus influentes dans ce système. Les résultats de ces analyses sont présentés sur les figures. Les Figures V-16 et V-17 présentent les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles à $\Phi = 1$, à basse température (T=650 K) et à haute température (T=1030 K).

Les réactions qui défavorisent la consommation du combustible ont des coefficients de sensibilité positifs. De ce fait les réactions consommant des radicaux hydroxyles, telle que la réaction entre le formaldéhyde et le radical OH (ch2o + oh ⇌ ch2oh + co, S = 0,280) réduisent la consommation du carburant. La formation de peroxyde d'hydrogène a aussi un effet inhibiteur sur la consommation du dodécane.

Les réactions présentant des coefficients de sensibilité négatifs favorisent ou contribuent à la consommation de l'hydrocarbure. Ainsi les réactions de métathèse entre le n-dodécane et les radicaux OH favorisent l'oxydation à basse température.

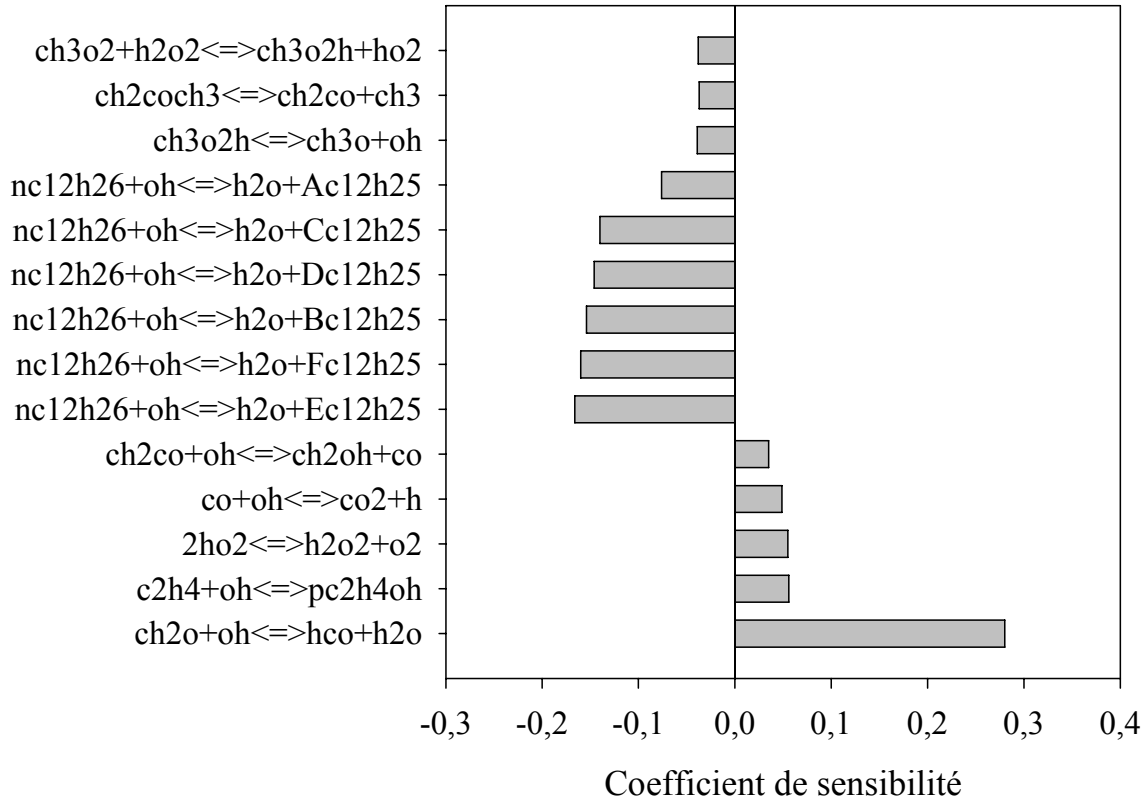


Figure V.16: Spectre de sensibilité du dodécane lors son oxydation en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=1, P=10 atm)

A T=1030 K, la réaction de ramification principale h + o2 ⇌ oh + o (avec S = -0,377) est celle qui influence le plus la vitesse de consommation du dodécane. La réaction entre le radical méthyle et le radical hydroperoxyle favorise également l'oxydation par la formation des radicaux OH. Les réactions de métathèse entre le combustible et les radicaux H et OH contribuent positivement à la consommation du dodécane.

La réaction ho2 + oh ⇌ h2o +o2 présente un coefficient de sensibilité positif S = 0,182. Cette réaction va ralentir la consommation du dodécane par consommation des radicaux OH. On observe aussi d'autres réactions sensibles favorisant le ralentissement de la consommation de l'hydrocarbure telle que la réaction ch3 + ho2 ⇌ ch4 + o2, S = 0,139. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction ch3 + ho2 ⇌ ch3o + oh, S = -0,295. Globalement les réactions ayant des coefficients de sensibilité positifs auront un effet inhibiteur plus faible sur la réactivité du dodécane qu'à basse température (T=650 K).

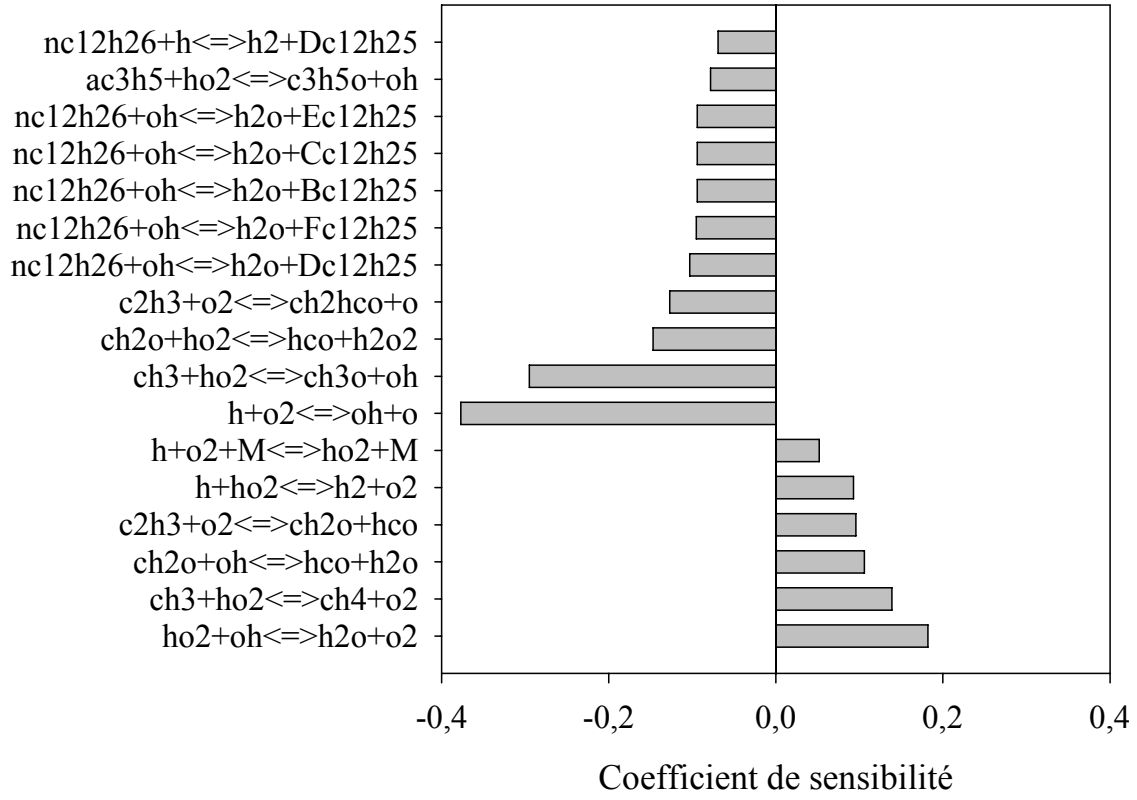


Figure V.17: Spectre de sensibilité du dodécane lors son oxydation en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=1, P=10 atm)

5.2.2.5 Validation en tube à choc

L'oxydation du n-dodécane a été étudiée en tube à choc par Vasu *et al* [4] et Davidson *et al* [5] à l'université de Stanford. Ils ont mesuré les délais d'auto-inflammation de mélanges n-dodécane/air en utilisant un tube à choc chauffé. Nous avons donc vérifié la validé de notre mécanisme sur la base des résultats obtenus expérimentalement par Vasu *et al* (délais d'auto-inflammation) et par Davidson *et al* (profils temporels d'espèces et délais d'auto-inflammation).

Vasu *et al* [4] ont étudié l'oxydation du dodécane dans un large domaine de température (727-1422 K) et de pression (15-34 atm) en milieu pauvre et en milieu stœchiométrique. La figure ci-dessous illustre la comparaison entre les résultats expérimentaux de Vasu *et al* [4] et nos modélisations.

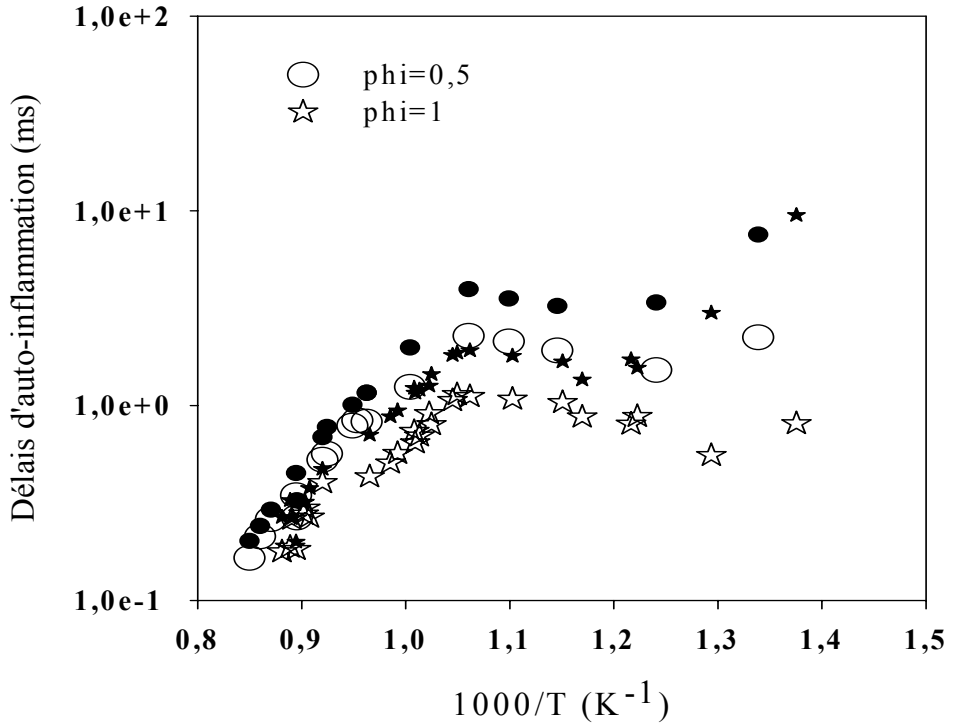
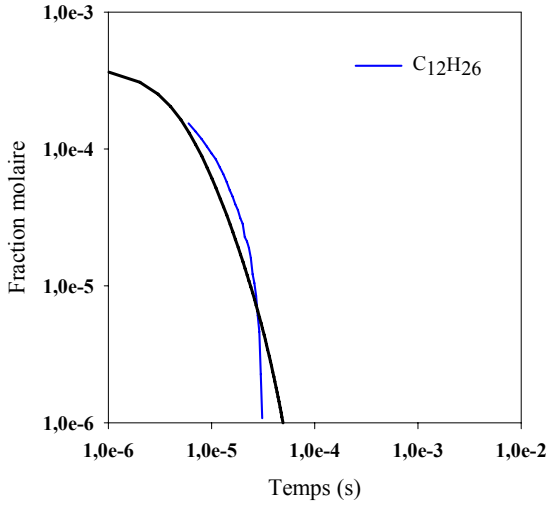


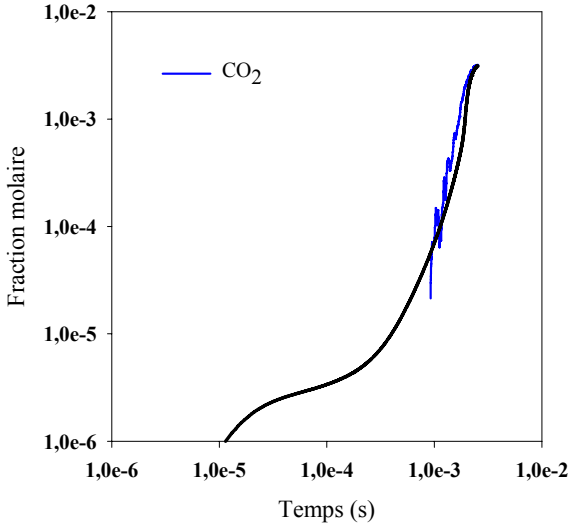
Figure V.18: Délais d'auto-inflammation des mélanges n-dodécane/O_2/N_2
Confrontation modèle (symboles pleins) –expérience (symboles vides) [4]
15<P (atm)<34 ; Φ=0,5 ($X_{dodécane}$:1,123% ; X_{02} : 20,77% ; X_{N2} : 78,10%)
Φ=1 ($X_{dodécane}$: 0,565% ; X_{02} : 20,89% ; X_{N2} : 78,55%)

On observe un accord acceptable entre les résultats expérimentaux et simulés (Figure V.18). Le modèle surestime les délais pour des températures comprises entre 747 et 1000 K. Cependant les délais d'auto-inflammation sont bien reproduits par le modèle à de très hautes températures (T > 1030 K) en milieu pauvre et en milieu stœchiométrique (T étant la température derrière l'onde de choc réfléchie).

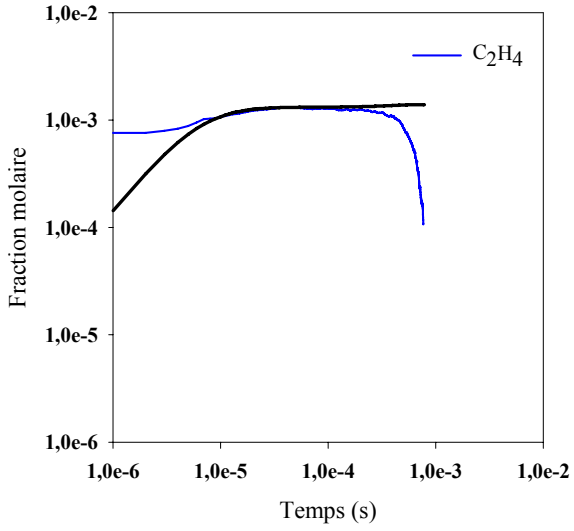
Davidson *et al* [5] ont mesuré les profils temporels de certaines espèces et les délais d'auto-inflammation entre 1300 et 1600 K, à des pressions proches de 2 atm pour des mélanges dodécane/oxygène/argon à Φ=1.



a) 1392 K; P=2,26 atm; 410 ppm $C_{12}H_{26}$/7500 ppm O_2/Ar

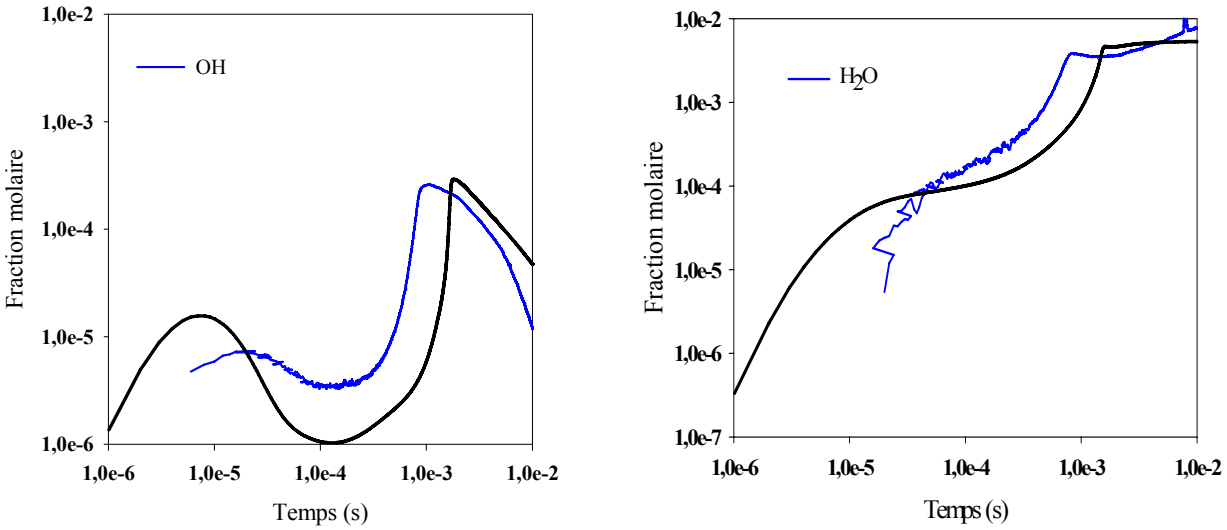


b) 1404 K; P=2,27 atm; 483 ppm $C_{12}H_{26}$/7500 ppm O_2/Ar



c) 1403 K; P=2,41 atm; 445 ppm $C_{12}H_{26}$/7500 ppm O_2/Ar

Figure V.19 : Confrontation modèle (noir)-expérience (bleu) lors de l'oxydation du n-dodécane en tube à choc



d) 1407 K; P=2,28 atm; 460 ppm $C_{12}H_{26}$/7500 ppm O_2/Ar

e) 1418 K; P=2,35 atm; 470 ppm $C_{12}H_{26}$/7500 ppm O_2/Ar

Figure V.19 : Confrontation modèle (noir)-expérience (bleu) lors de l'oxydation du n-dodécane en tube à choc

On note que le modèle ne prédit pas la baisse brutale de la concentration d'éthylène C_2H_4 (Figure V.19-c). Ceci peut s'expliquer par la consommation tardive du radical hydroxyle OH lors de la simulation (Figure V.19-d).

Les délais d'auto-inflammation mesurés dans les travaux de Davidson *et al* [5] ont été définis comme étant le temps qui sépare le passage de l'onde de choc incidente et 50 % du maximum du pic d'émissions des espèces OH, H_2O et C_2H_4.

Le mécanisme reproduit convenablement les délais d'auto-inflammation aux plus hautes températures mais sous-estime la réactivité aux plus basses températures (Figure V.20).

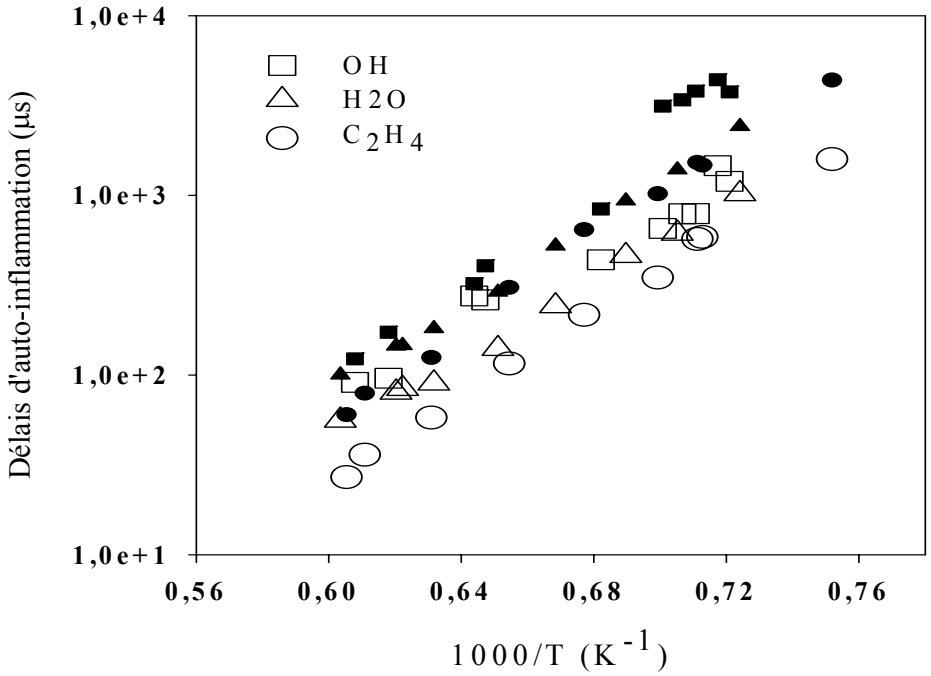


Figure V.20: Délais d'auto-inflammation des mélanges n-dodécane/O_2/Ar

Confrontation modèle (symboles pleins) –expérience (symboles vides) [5] 2,06<P (atm)<2,48 ; Φ=1

Les résultats expérimentaux obtenus sur l'oxydation des hydrocarbures lourds (n-undécane et n-dodécane) en réacteur auto-agité nous ont permis de valider le mécanisme cinétique développé. Le modèle a aussi été validé dans un autre dispositif expérimental (le tube à choc) à plus haute pression et plus haute température.

5.2.3 Comparaison entre le modèle développé, un modèle issu de la littérature et les résultats expérimentaux obtenus en milieu stœchiométrique

Dans cette section, nous présentons une comparaison entre les résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation du n-undécane et ceux obtenus avec notre modèle et celui proposé par Westbrook *et al* [6]. Pour cette confrontation, on a considéré les principaux polluants produits lors de l'oxydation du n-undécane (CO, CO_2, CH_4, C_2H_4, CH_2O, 1,3-C_3H_4) à une richesse Φ = 1.

Les comparaisons des profils de concentrations d'espèces simulés sont présentées sur les figures ci-dessous.

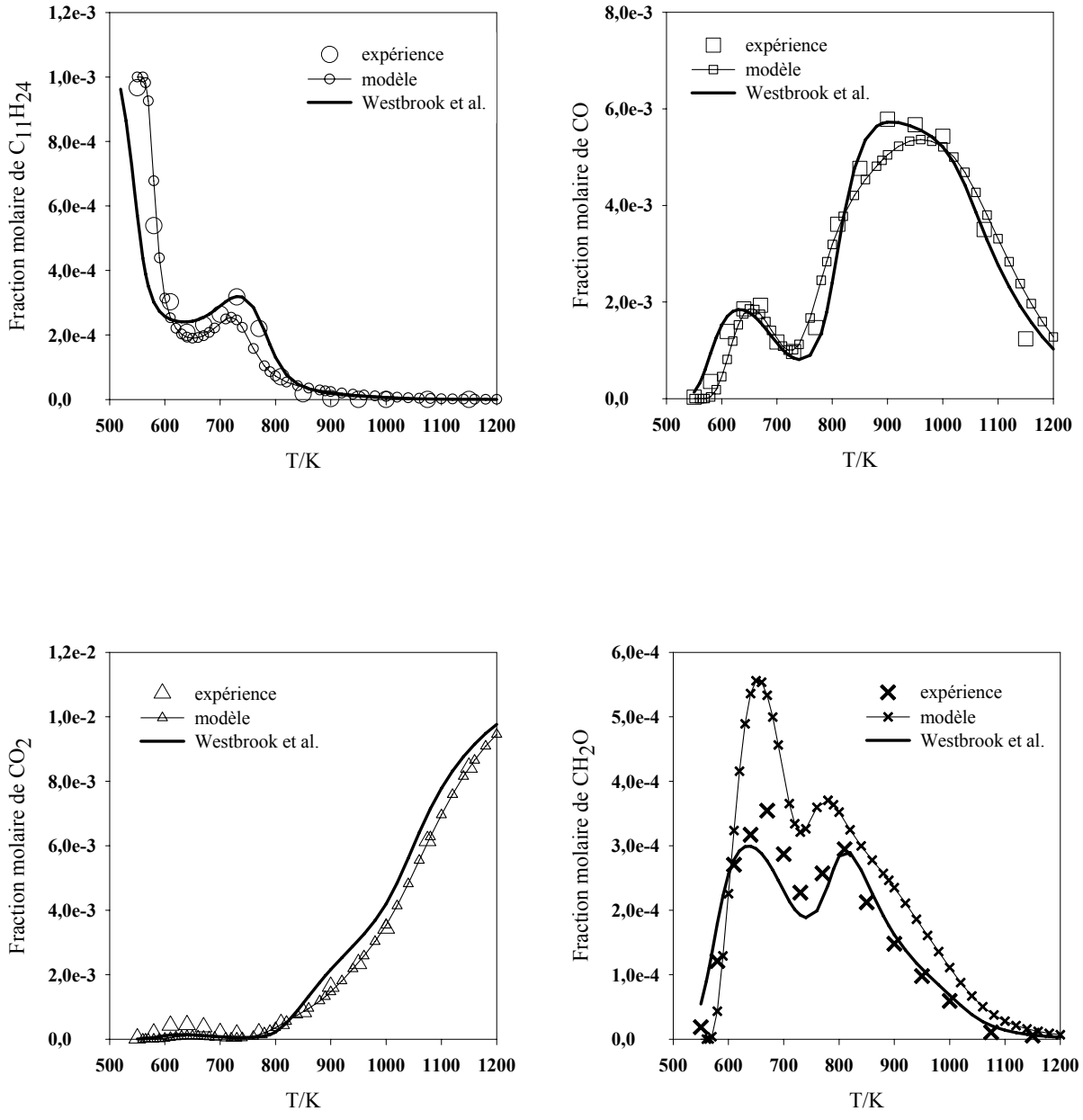


Figure V.21: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles)-modèle Westbrook *et al* [6] (trait plein) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ;

Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,2%

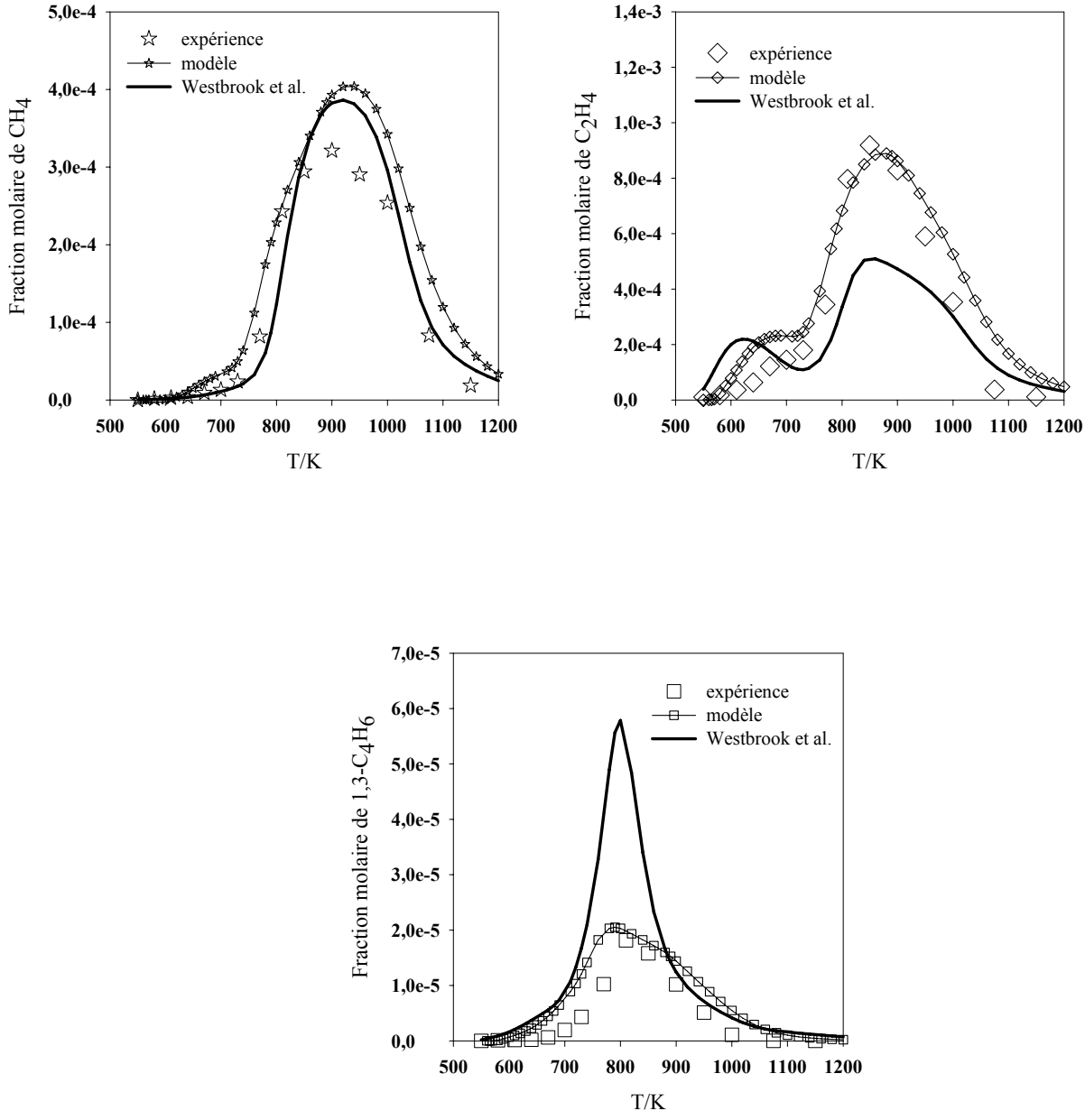


Figure V.21: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles)-modèle Westbrook *et al* [6] (trait plein) pour l'oxydation du n-undécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,2%

Les deux modèles reproduisent correctement l'allure des profils de concentrations. Le modèle développé dans cette étude simule convenablement l'hydrocarbure initial, le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'éthylène et le buta-1,3-diène. Par contre il surestime les quantités de CH_2O à basse et haute température. Il surestime aussi les quantités de CH_4 pour des températures voisines de 900 K. Le modèle développé par Westbrook *et al* [6] reproduit convenablement le formaldéhyde mais surestime largement les fractions molaires de 1,3-C_4H_6. Les fractions molaires de C_2H_4 sont surestimées à basse température mais sous estimées à haute température entre 750 et 1000 K (d'un facteur deux) avec le modèle de Westbrook.

Avec le modèle de Westbrook [6], le undécane est trop rapidement consommé à basse température, alors que les profils expérimentaux et simulés avec notre modèle sont en bonne accord.

Pour résumer, on observe un bon accord entre les résultats expérimentaux et simulés avec les deux modèles, avec un léger avantage pour le mécanisme développé ici.

5.2.4 Oxydation du n-tétradécane

Nous avons aussi étudié l'oxydation du n-tétradécane $C_{14}H_{30}$ en réacteur auto-agité par jets gazeux. Les profils de concentrations mesurés seront confrontés avec les résultats issus de simulations utilisant le mécanisme cinétique développé par Westbrook *et al* [6] pour l'oxydation des alcanes lourds. Ce modèle cinétique de basse et haute température a été validé par les auteurs en utilisant les résultats obtenus JSR par Dagaut [7].

5.2.4.1 Conditions expérimentales

L'oxydation n-tetradécane (M=198,39 $g.mol^{-1}$; ρ=0 ,76 $g.cm^{-3}$) a été étudiée en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) dans une large gamme de températures ($560 \leq T\ (K) \leq 1030$), à haute pression et à différentes richesses correspondantes (0,5, 1 et 2). Tout au long de nos expériences le temps de passage a été maintenu constant (τ=1 s).

Le tableau ci-après présente les conditions expérimentales utilisées pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{tetradécane}$	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$4{,}300.10^{-2}$	$9{,}560.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$2{,}150.10^{-2}$	$9{,}755.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}075.10^{-2}$	$9{,}883.10^{-1}$	2

Tableau V.4: Conditions expérimentales pour l'oxydation du n-tétradécane en JSR

5.2.4.2 Résultats expérimentaux

Les résultats obtenus nous ont permis de suivre l'évolution de la concentration de nombreuses espèces lors de l'oxydation du n-tétradécane (réactifs, espèces intermédiaires stables et produits finals de combustion) en fonction de la température et de la richesse du milieu (voir les Figures V.22, V.23 et V.24). Nous avons identifiés une trentaine d'espèces grâce à nos moyens d'analyse. Les espèces majoritaires détectées sont les espèces oxygénées telles que le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, le formaldéhyde ou encore l'hydrogène et quelques hydrocarbures imbrûlés tels que l'éthylène, le méthane. On remarque également une production notable de méthanol (CH_3OH), d'acétaldéhyde (CH_3CHO) et de C_3H_6. Des espèces minoritaires ont aussi pu être détectées. On a donc observé donc l'éthane (C_2H_6), des alcènes allant du but-1-ène (1-C_4H_8) jusqu'au undécène ($C_{11}H_{22}$), l'acétylène, des aldéhydes tels le propanal (C_2H_5CHO), l'acroléine (C_3H_4O), le butanal (C_3H_7CHO), le pentanal (C_4H_9CHO), l'hexanal ($C_5H_{11}CHO$) ainsi que d'autres espèces oxygénées, i.e. l'acétone (CH_3COCH_3), le butanone (C_4H_8O), l'oxirane (C_2H_4O) et le furane (C_4H_4O). Le benzène (C_6H_6) a aussi été détecté en concentration négligeable.

Le tétradécane est très réactif entre 560 et 710 K. Il en résulte une formation notable de CO et CO_2. La zone de coefficient négatif de température qui se traduit par une baisse de la réactivité s'étend entre ≈ 710 et 770 K. Cette baisse de réactivité est visible sur le profil du tétradécane à Φ=1 et 2 et sur les profils de CO et CO_2. L'hydrocarbure est par la suite

consommé à des températures supérieures à 770 K par le mécanisme d'oxydation de haute température. Pour Φ = 0,5 et 2 le premier régime d'oxydation est observé entre 560 et 650 K. Entre 650 et 740 K on observe une baisse de la réactivité. Le tétradécane va subir une nouvelle accélération de réactivité à T > 740 K.

5.2.4.3 Confrontation expérience-modèle

Les figures suivantes présentent une comparaison entre les principaux résultats obtenus en réacteur auto agité et les résultats simulés par le mécanisme de Westbrook *et al* [6] lors de l'oxydation du n-tétradécane entre 560 et 1030 K, à 10 atm et à trois richesses.

Comme on peut le constater, la modélisation surestime la vitesse de consommation du n-tétradécane à basse température. Par contre, le modèle sous-estime la conversion du n-tétradécane aux températures intermédiaires en milieu pauvre et à la stœchiométrie. Pour une richesse de 2, la fraction molaire de l'hydrocarbure est sous estimé dans tout le domaine de température. Toutefois, le modèle reproduit assez correctement les profils de concentration d'oxygène.

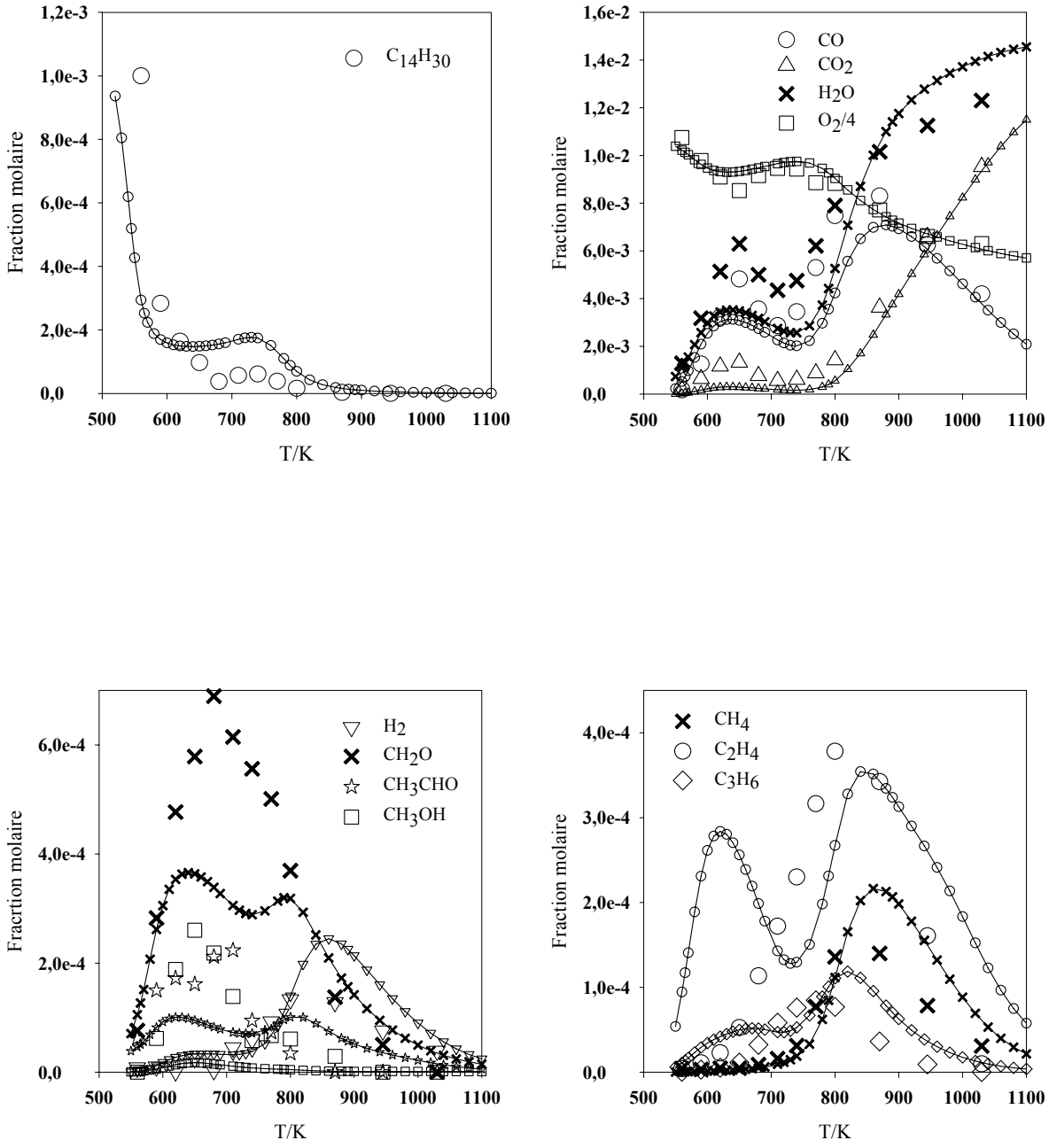


Figure V.22: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=4,3% ; X_{N2}=95,6%

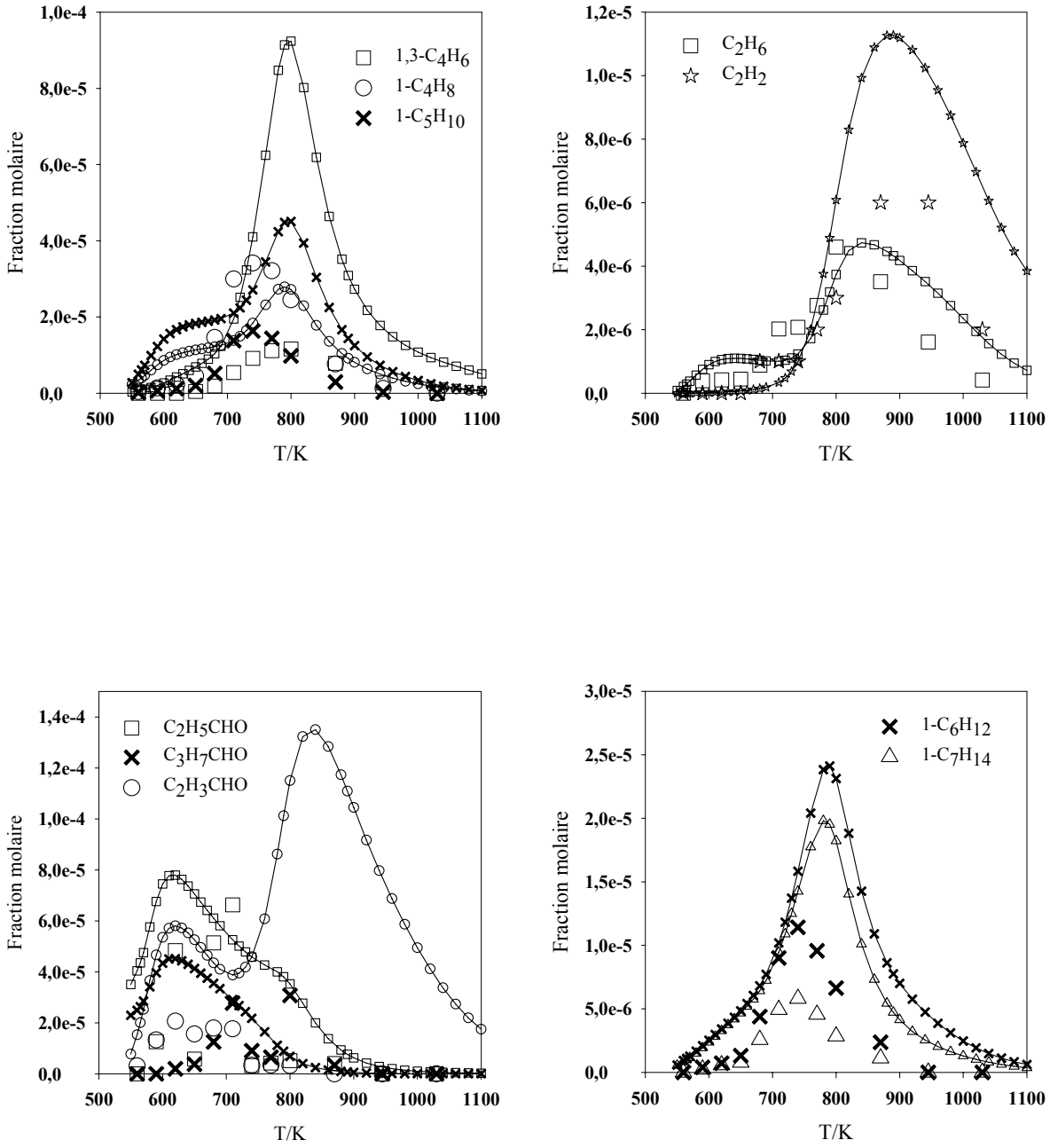


Figure V.22: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=4,3% ; X_{N2}=95,6%

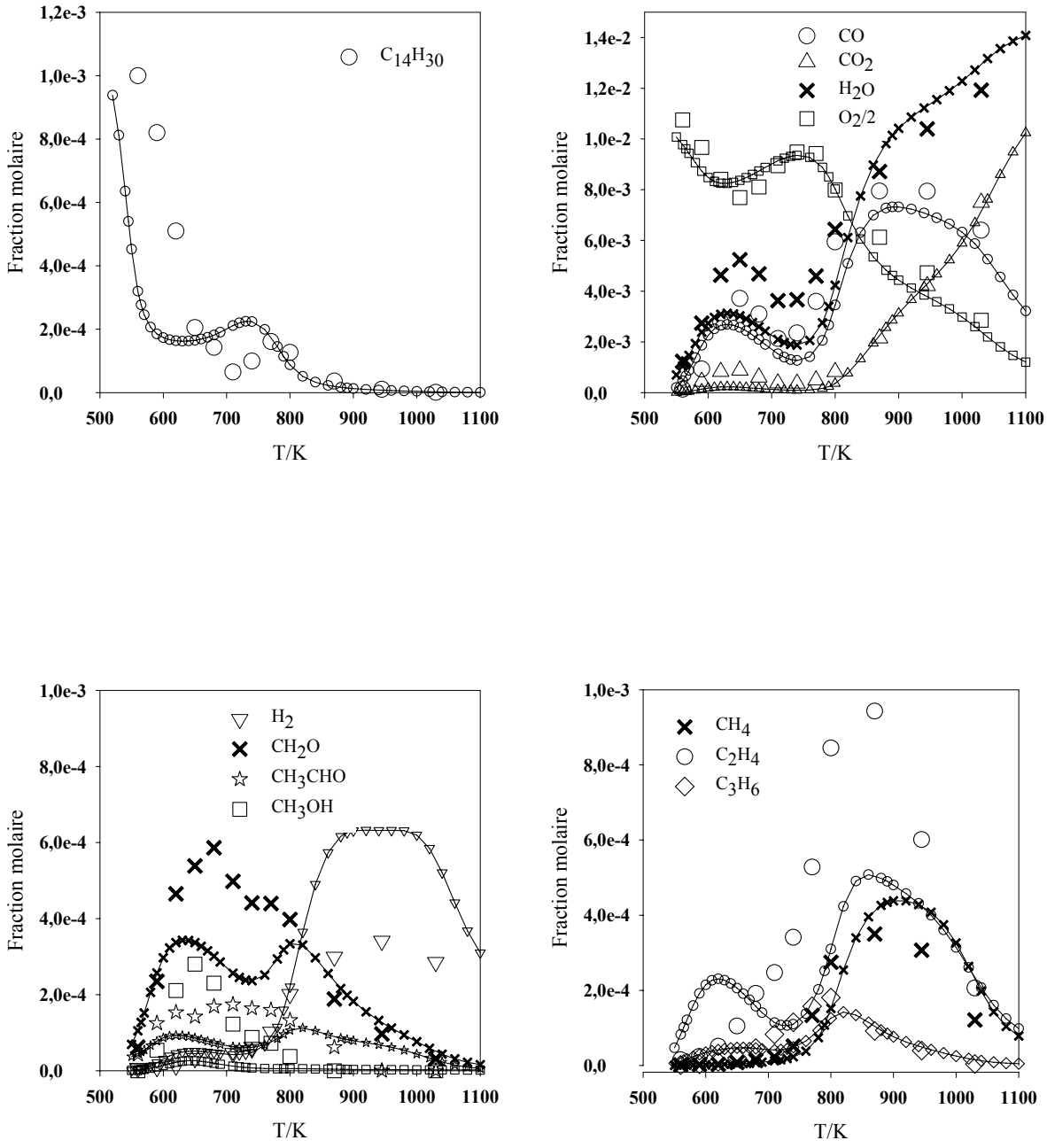


Figure V.23: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=2,15%; X_{N2}=97,75%

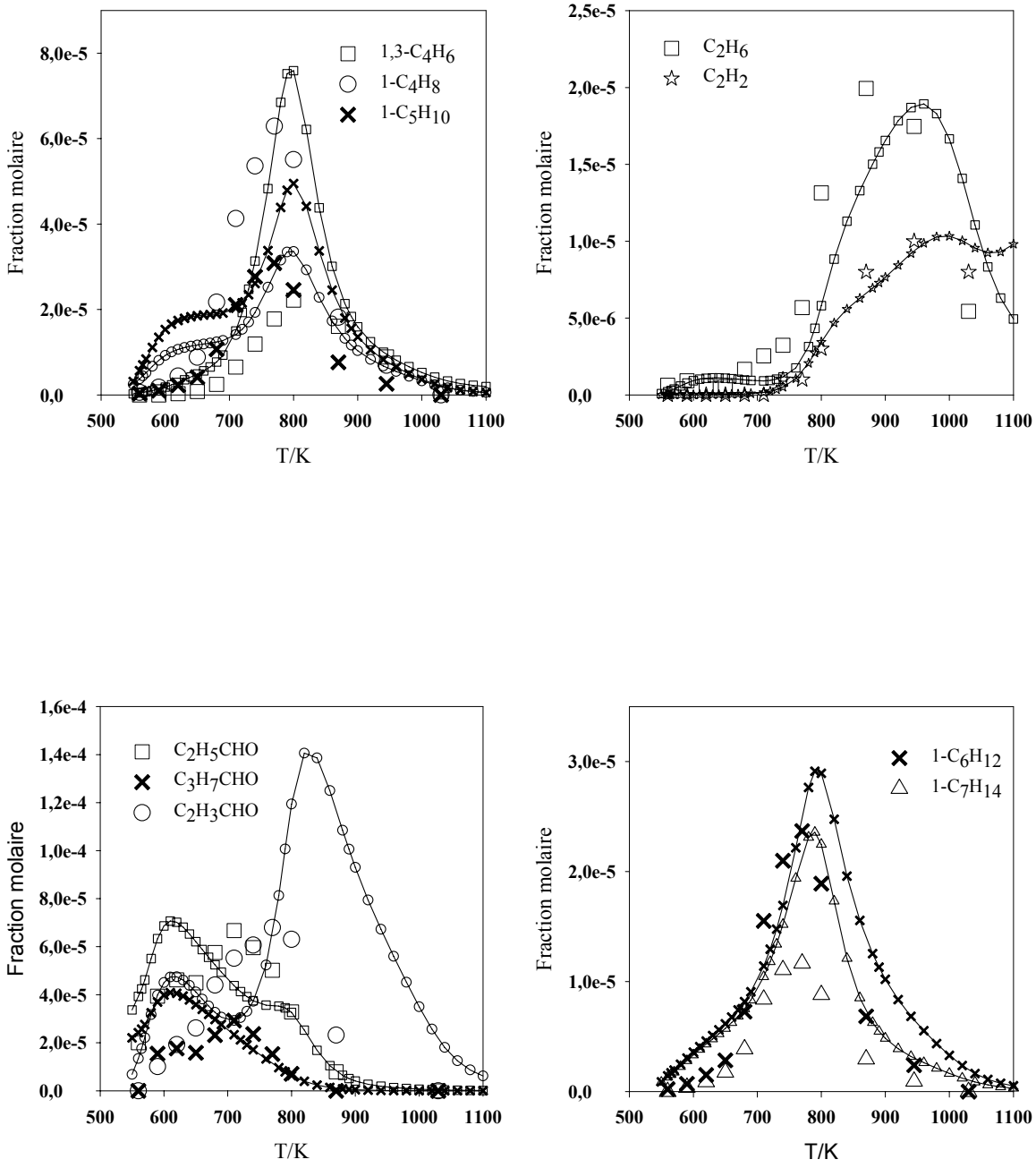


Figure V.23: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=2,15%; X_{N2}=97,75%

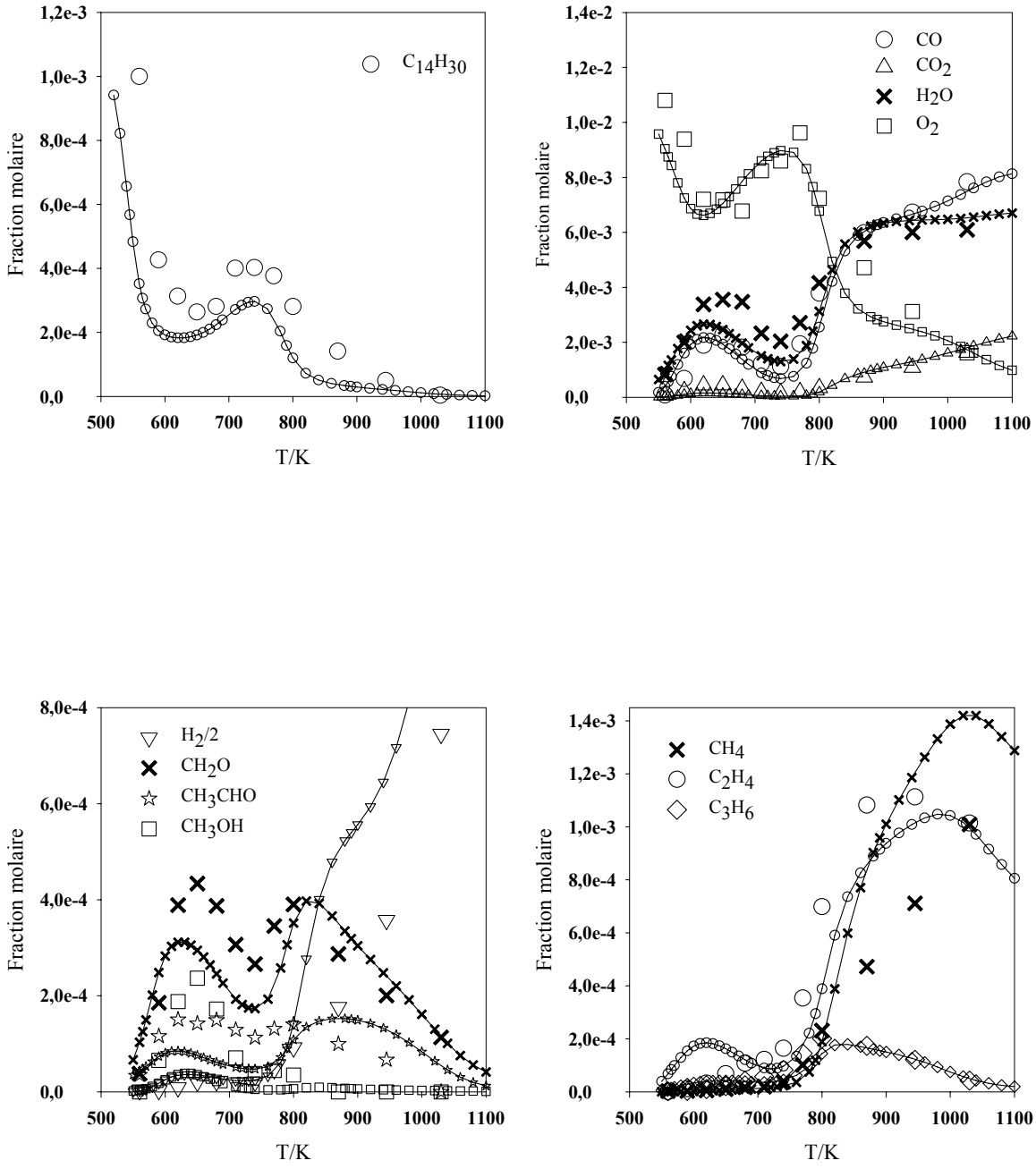


Figure V.24: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,08%; X_{N2}=98,83%

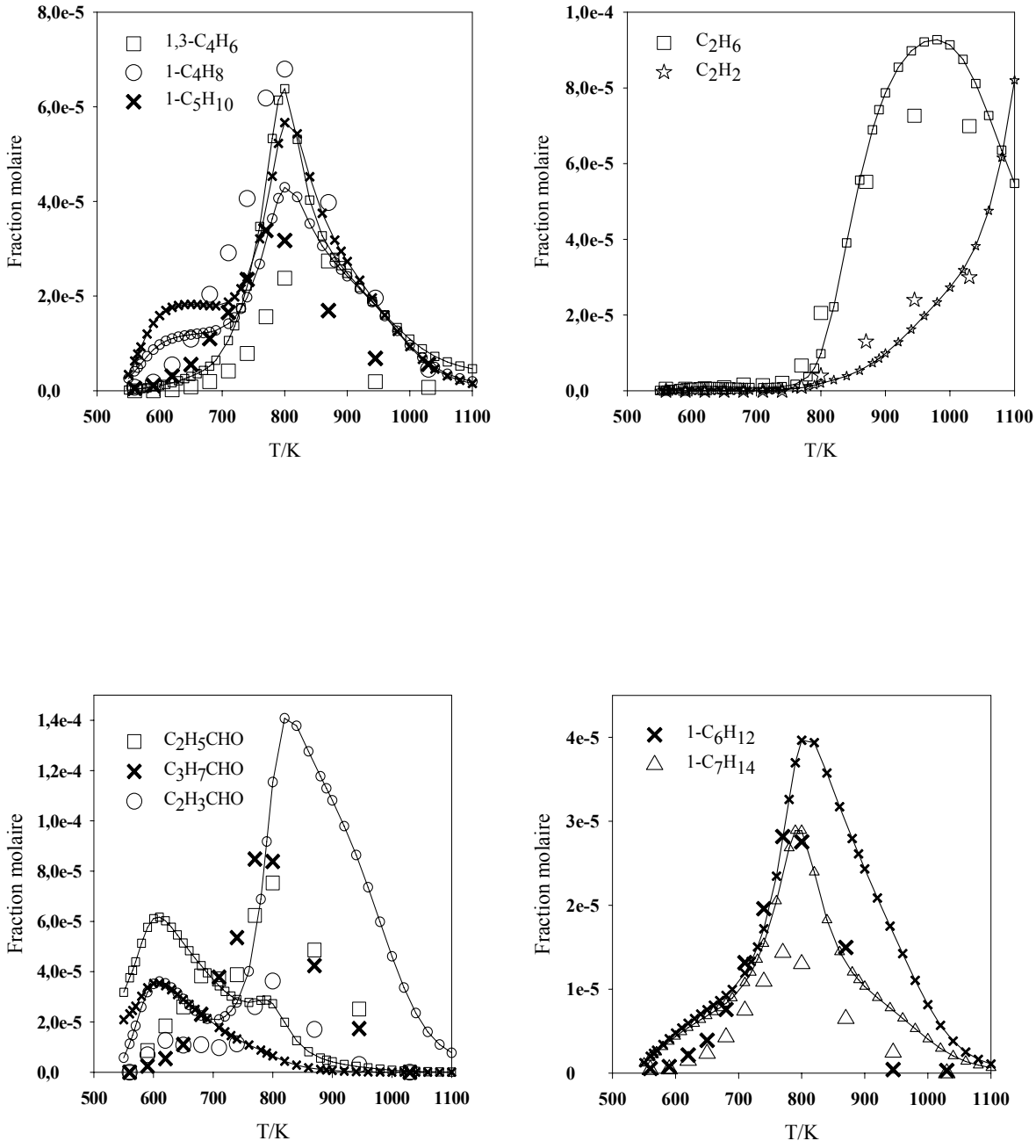


Figure V.24: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du n-tétradécane en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,08%; X_{N2}=98,83%

On constate un bon accord entre modélisation et expérience en milieu riche, pour le CO. Les quantités de CO_2 sont sous-estimées à basse température mais bien reproduites à haute température. Les concentrations d'eau sont sous-estimées à basse température mais surestimées pour des températures supérieures à 800 K. Les quantités de méthane sont bien reproduites à basse température mais surestimés pour T > 800 K. Les concentrations de 1-butène sont sous-estimées. Par contre, celles des autres alcènes (buta-1,3-diène, pent-1-ène, hex-1-ène et hept-1-ène) sont surestimées. Cependant le modèle et l'expérience indiquent que ces alcènes atteignent leur fraction molaire maximale à des températures proches de 800 K. Le profil de concentration d'acétylène est lui reproduit correctement à Φ=2. La simulation reproduit assez convenablement le profil de concentration de formaldéhyde à basse et haute température, mais le sous-estime pour des températures intermédiaires comprises entre 650 et 770 K. Les aldéhydes sont globalement mal représentés par le modèle.

5.2.5 Étude comparative entre l'oxydation des hydrocarbures lourds

Les tableaux ci-dessous récapitulent les conditions expérimentales utilisées en réacteur auto-agité lors des oxydations des hydrocarbures lourds et les concentrations maximales des principaux polluants et imbrûlés émis à la stœchiométrie.

Carburant	Formule brute	M (g/mol)	Z	P (atm)	τ (s)	T (K)	richesse	X_{HC}	référence
Décane	$C_{10}H_{22}$	142,29	15,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%	Diévart
Undécane	$C_{11}H_{24}$	156,31	17	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%	Cette étude
Dodécane	$C_{12}H_{26}$	170,34	18,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%	
Tétradécane	$C_{14}H_{30}$	198,39	21,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%	

Tableau V.5: Récapitulatif des conditions expérimentales en JSR

HC / Imbrûlé	Décane	Undécane	Dodécane	Tétradécane
CH_4 X_{max} (T_{max})	280 (900K)	321,4 (900K)	339 (870K)	350 (870K)
C_2H_4 X_{max} (T_{max})	892 (850K)	919 (850K)	902,5 (870K)	943 (870K)
1,3-C_4H_6 X_{max} (T_{max})	19 (815K)	18 (810K)	16 (800K)	22 (800K)
CH_2O X_{max} (T_{max})	420 (655K) 324 (810K)	354,4 (640K) 294,6 (810K)	477 (680K) 356 (800K)	586 (680K) 440 (770K)
CH_3CHO X_{max} (T_{max})	154,4 (670K) 140 (770K)	134 (670K) 96 (810K)	139 (680K) 122 (770K)	154 (620K) 174 (710K)

Tableau V.6: Fractions molaires maximales (X/ppm) des principaux polluants et imbrûlés émis à Φ=1 en JSR

Les résultats obtenus lors de la combustion des différents hydrocarbures à longue chaîne carbonée (n-décane, n-undécane, n-dodécane et n-tétradécane) en réacteur auto-agité dans les mêmes conditions opératoires nous permettent d'observer un comportement similaire lors de la combustion de ces alcanes lourds. Les quantités maximales de chaque polluant sont atteintes à des températures proches, quelque soit le composé étudié (Tableau V.6). On remarque également que les maxima de concentration des aldéhydes (formaldéhyde et acétaldéhyde) apparaissent généralement à des températures plus faibles que pour les autres composés intermédiaires ciblés.

5.2.6 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du n-undécane à Φ = 1

Les résultats obtenus expérimentalement en réacteur auto-agité nous ont permis d'effectuer une étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 ($C_{11}H_{22}$) et l'oxydation d'un hydrocarbure lourd de référence, le n-undécane ($C_{11}H_{24}$).

5.2.6.1 Réactivité

Dans le but de comparer la réactivité de nos deux carburants, nous avons tracé les profils de concentrations des principaux produits formés CO et CH_2O en fonction de la température lors de deux expériences d'oxydation menées dans les mêmes conditions.

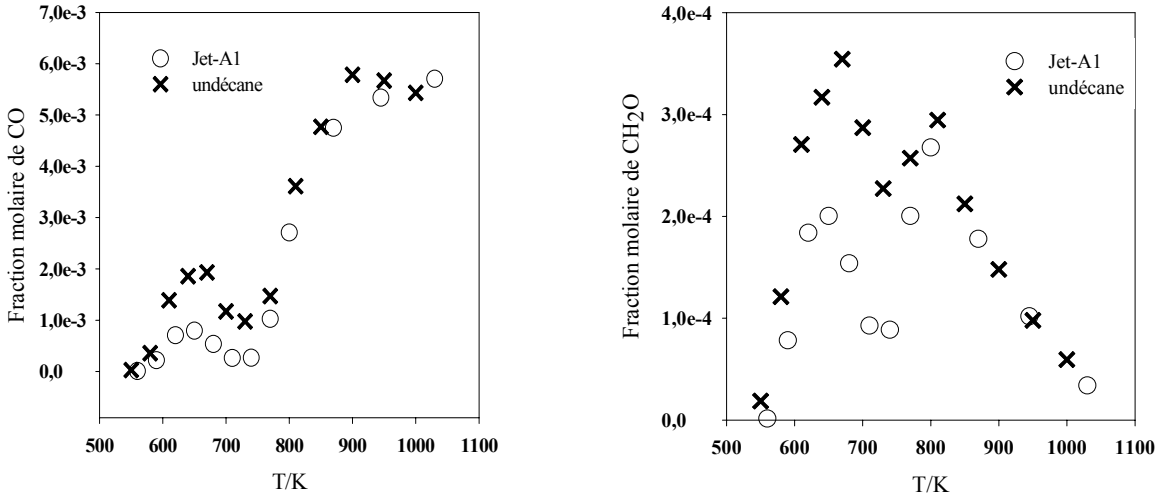


Figure V.25: Oxydation du kérosène Jet A-1 et du n-undécane en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

Les résultats indiquent que le undécane est plus réactif à basse température. En effet les quantités de CO et CH_2O produites pendant la flamme froide sont plus élevées que lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1. Le profil du formaldéhyde nous le confirme. Quelque soit le carburant les quantités maximales de CH_2O sont formées à des températures proches de 640 K (à basse température) et 810 K (à haute température). Le coefficient négatif de température est visible entre 640 et 730 K. On observe une réactivité similaire entre les deux carburants pour des températures plus élevées. Globalement les deux carburants se comportent de manière équivalente lorsqu'ils sont oxydés en JSR.

5.2.6.2 Espèces formées lors des oxydations

On a ensuite comparé les concentrations des principales espèces issues des deux oxydations (avec X_{HC}=0,1%).

Les fractions molaires maximales des principaux polluants émis en milieu stœchiométrique sont reportées ci-dessous.

HC / Imbrûlé	Jet A-1	Undécane
CH_4 X_{max} (T_{max})	321 (870K)	321 (900K)
C_2H_4 X_{max} (T_{max})	530 (870K)	918,8 (850K)
1,3-C_4H_6 X_{max} (T_{max})	12 (870K)	18 (810K)
CH_3CHO X_{max} (T_{max})	64 (620K) 83 (800K)	134 (670K) 96 (800K)

Tableau V.7 : Fractions molaires maximales (X/ppm) des principaux polluants et imbrûlés émis à Φ=1 en JSR.

Les profils de concentrations mesurés pour les principaux polluants émis sont similaires. L'éthylène est l'hydrocarbure majoritaire formé lors des deux expériences d'oxydation. La concentration maximale de C_2H_4 est mesurée à des températures proches de 860 K.

5.3 Étude cinétique de l'oxydation de kérosènes reformulés

Cette section présente les résultats des différentes études expérimentales menées en réacteur auto-agité sur l'oxydation des carburéacteurs alternatifs. Nous avons choisi d'étudier l'oxydation de mélanges d'hydrocarbures et de composés oxygénés tels que les mélanges kérosène/hexan-1-ol 90/10 en masse et kérosène/RME 90/10 en masse. Des mécanismes cinétiques adaptés à ces carburants reformulés ont été développés puis validés par confrontation avec les résultats expérimentaux.

5.3.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, en masse)

Nous avons dans un premier temps étudié l'oxydation d'un mélange de carburéacteur classique le Jet A-1 et d'alcool. Le réacteur auto-agité nous a donc permis d'étudier l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m). Les résultats obtenus ont été par la suite modélisés en utilisant le mécanisme cinétique développé.

5.3.1.1 Conditions expérimentales

L'oxydation du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10 en masse) a été réalisée en réacteur auto-agité dans un large domaine de températures (560 à 1030 K), à haute pression (10 atm), à un temps de passage constant (1 s) et à des richesses comprises entre 0,5 et 2. Les caractéristiques physico-chimiques de ce mélange sont les suivantes:

- formule chimique $C_{10,28}H_{20,85}O_{0,14}$
- masse molaire M = 144,37 $g.mol^{-1}$
- masse volumique ρ = 0,807 $g.cm^{-3}$
- coefficient stœchiométrique Z = 15,42

Les conditions expérimentales sont résumées dans le tableau suivant :

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$3,084.10^{-2}$	$9,682.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,542.10^{-2}$	$9,836.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$7,710.10^{-3}$	$9,913.10^{-1}$	2

Tableau V.8: Conditions expérimentales pour l'oxydation du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10, m/m) en JSR

5.3.1.2 Résultats expérimentaux

Nous avons identifié plusieurs espèces lors de l'oxydation de notre mélange massique kérosène Jet A-1/hexan-1-ol (90/10). Les profils de concentrations des principales espèces issues de l'oxydation du mélange ont été tracés en fonction de la température du milieu pour trois richesses (voir les figures V.26, V.27 et V.28). L'évolution de la quantité d'hexan-1-ol en fonction de la température a aussi été étudiée.

On a identifié des espèces majoritaires et minoritaires lors de l'oxydation de notre mélange. Parmi les espèces majoritaires, on observe les espèces oxygénées telles que le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, l'eau et l'acétaldéhyde. Les autres espèces intermédiaires détectées sont l'éthylène, l'hydrogène, le méthane et le propène. Parmi les espèces minoritaires on a pu suivre l'évolution du but-1-ène, buta-1,3-diène, pent-1-ène, benzène, de l'hexanal et de l'acétylène en fonction de la température. D'autres espèces (l'éthane, le méthanol, l'hex-1-ène, le propanal, l'oxirane, le toluène) ont été identifiées en faibles concentrations.

Comme lors de nos précédentes expériences d'oxydation nous avons identifié les principaux polluants de l'air (formaldéhyde, acétaldéhyde, buta-1,3-diène et benzène) et certains gaz à effet de serre dont le méthane et le dioxyde de carbone.

5.3.1.3 Confrontation expérience-modèle

Les données expérimentales obtenues lors de l'oxydation du bio-kérosène en JSR nous ont permis d'effectuer une comparaison entre l'expérience et le modèle développé. Les profils expérimentaux et modélisés de concentrations des réactifs, produits et espèces intermédiaires stables issus de l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol sont présentés sur les figures suivantes.

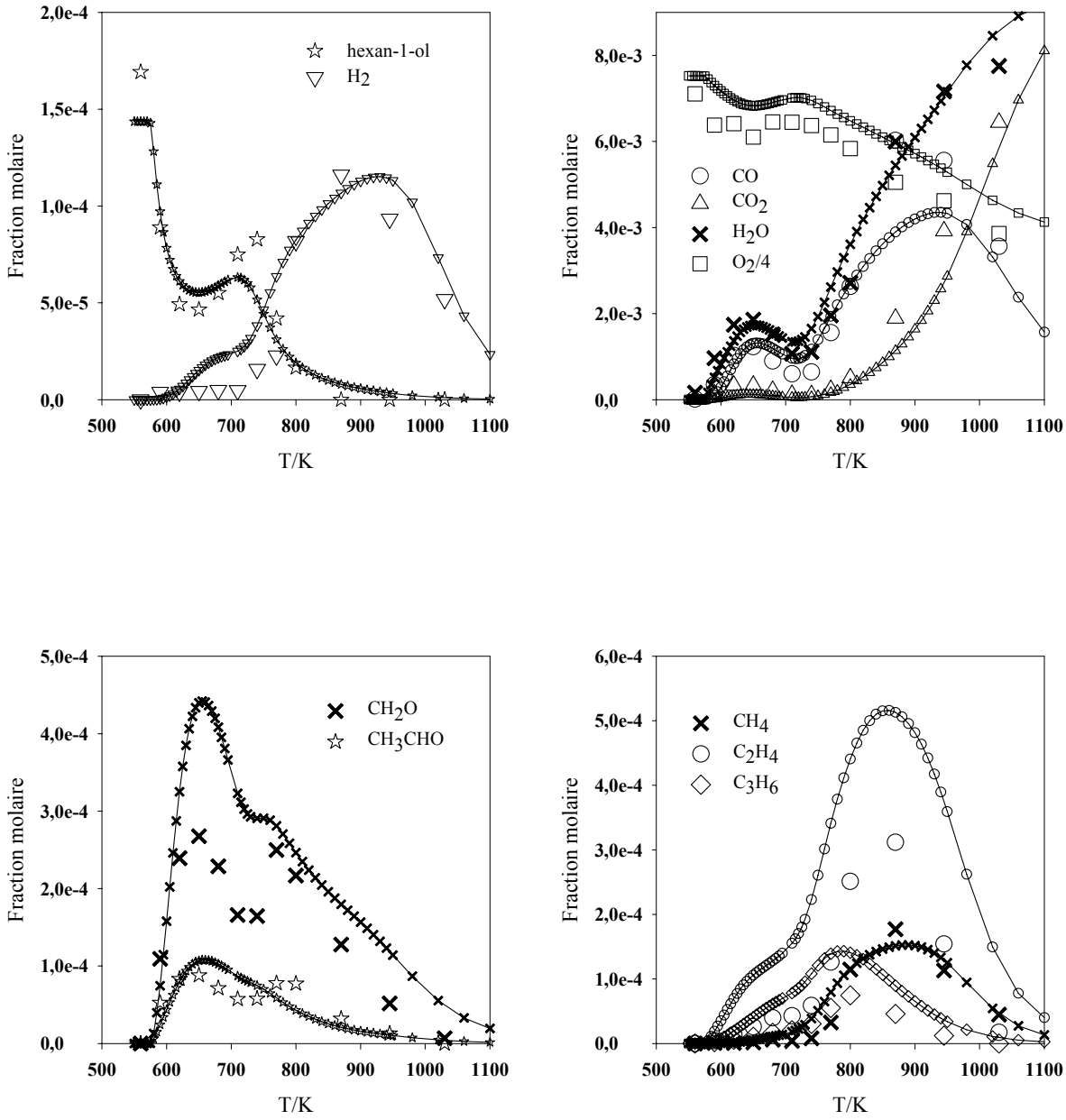


Figure V.26: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,084% ; X_{N2}=96,816% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=3,01% ; X_{N2}=96,88%

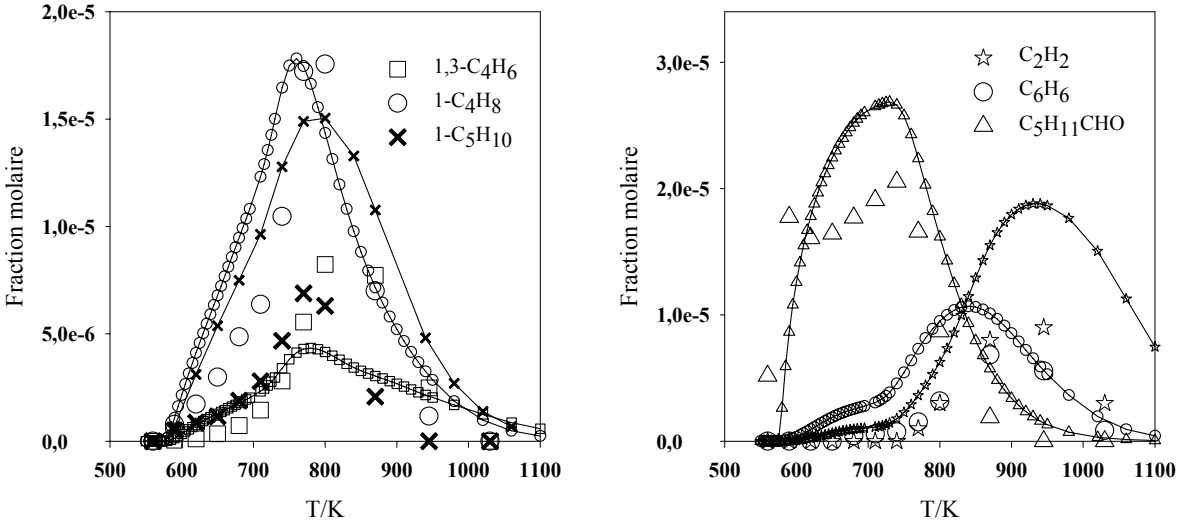


Figure V.26: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,084% ; X_{N2}=96,816% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=3,01% ; X_{N2}=96,88%

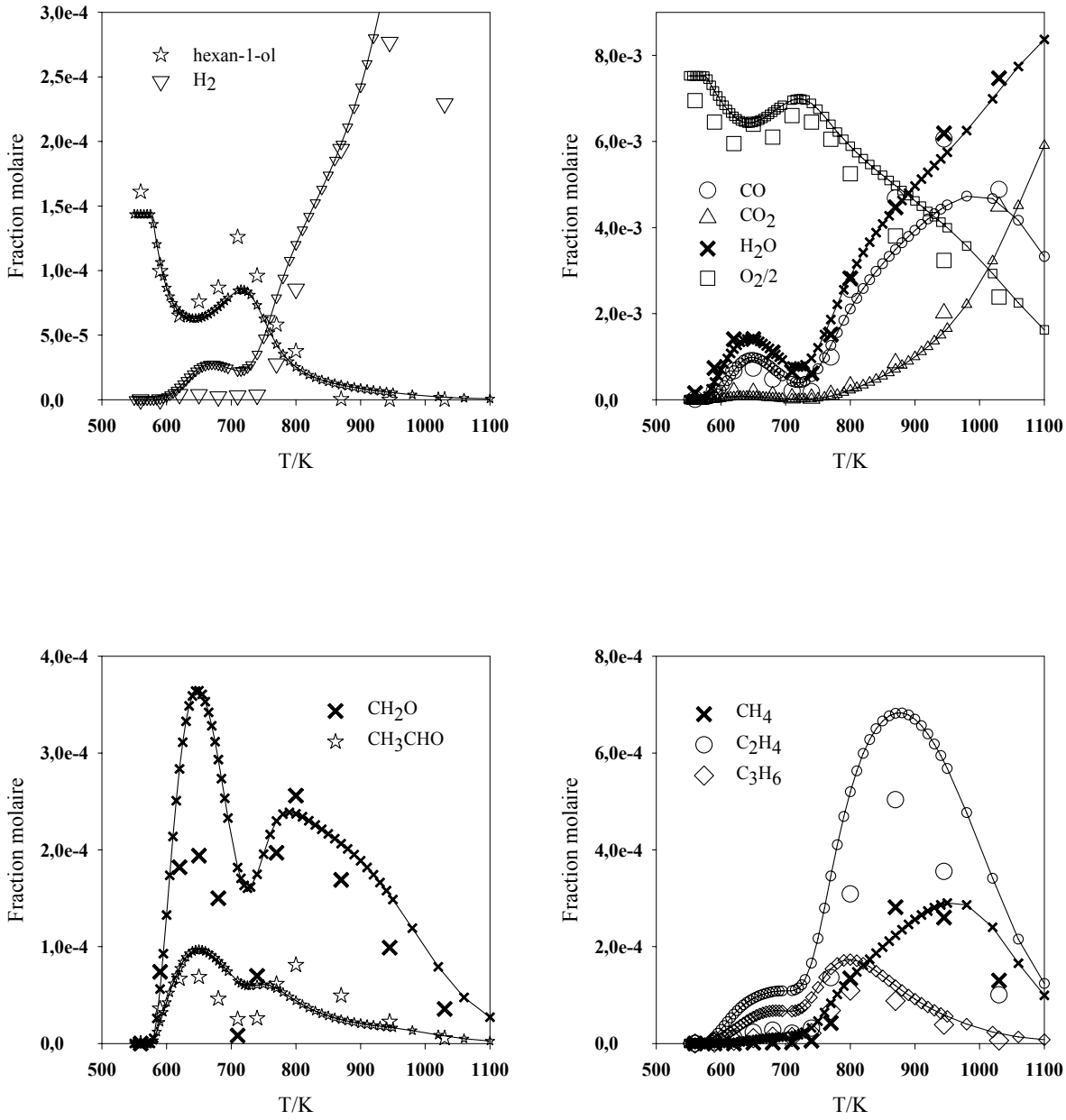


Figure V.27: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,54% ; X_{N2}=98,36% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=1,51% ; X_{N2}=98,38%

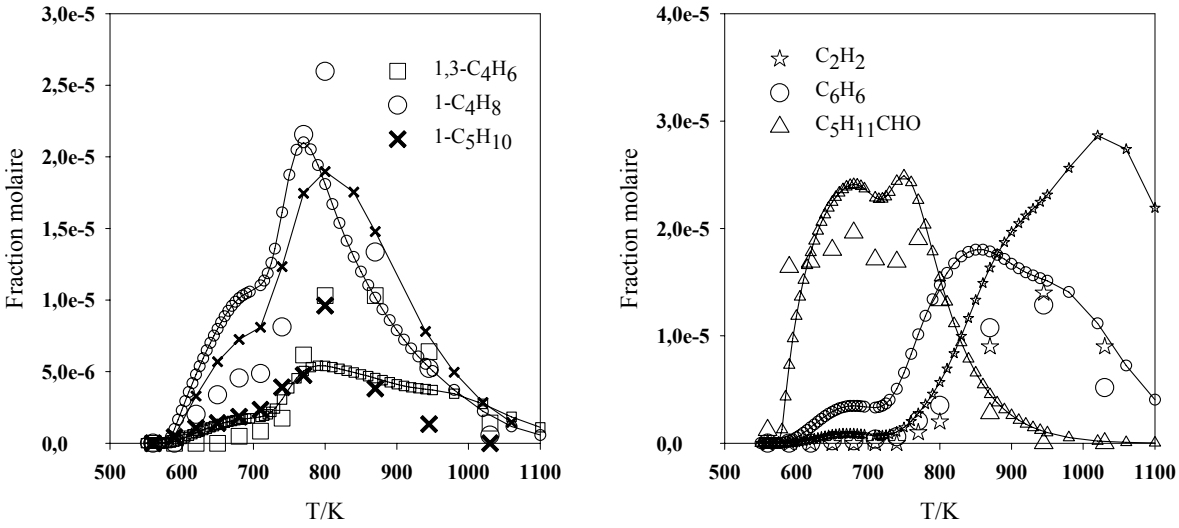


Figure V.27: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,54% ; X_{N2}=98,36% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=1,51% ; X_{N2}=98,38%

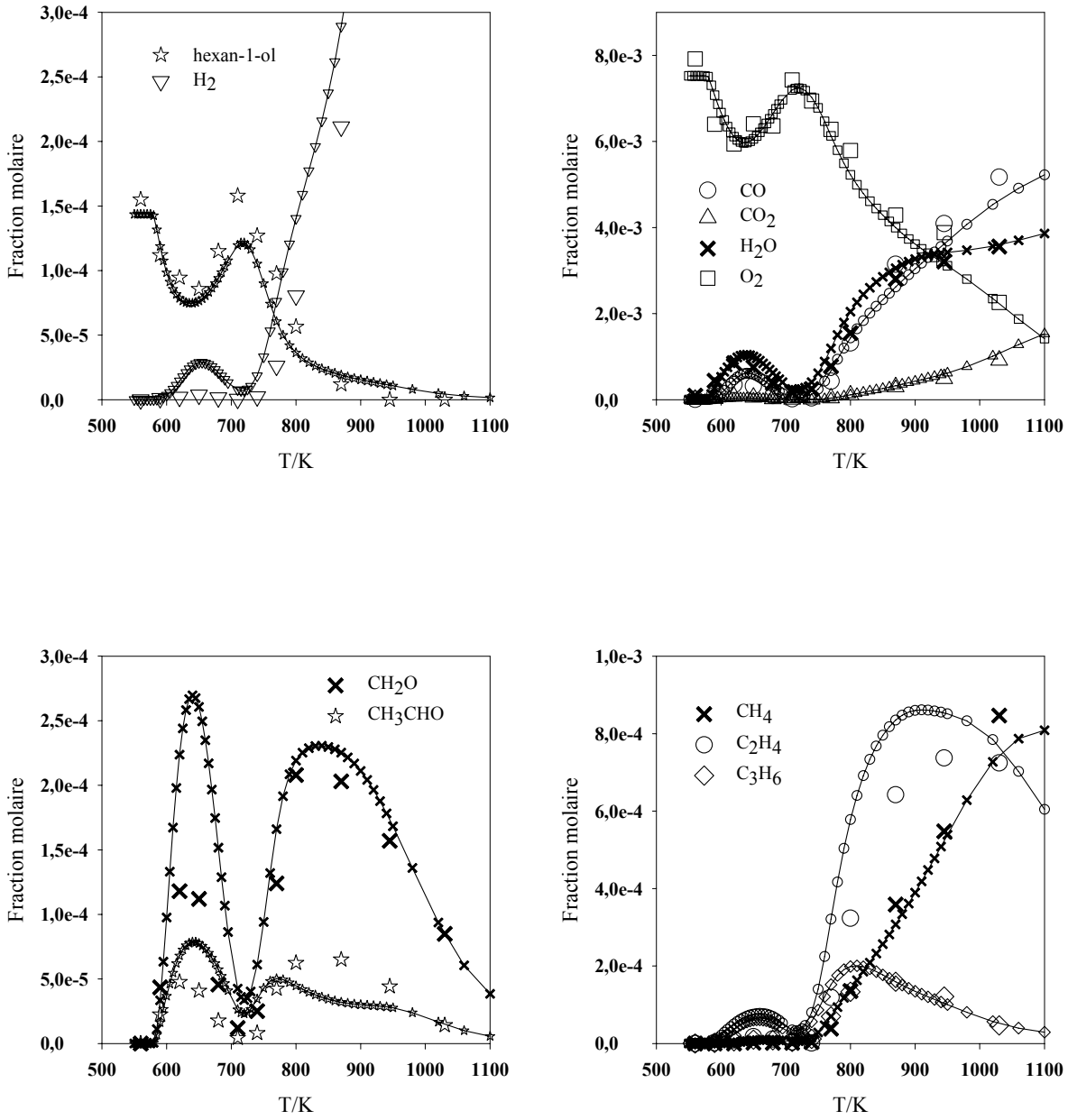


Figure V.28: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,77%; X_{N2}=99,13% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=0,75% ; X_{N2}=99,14%

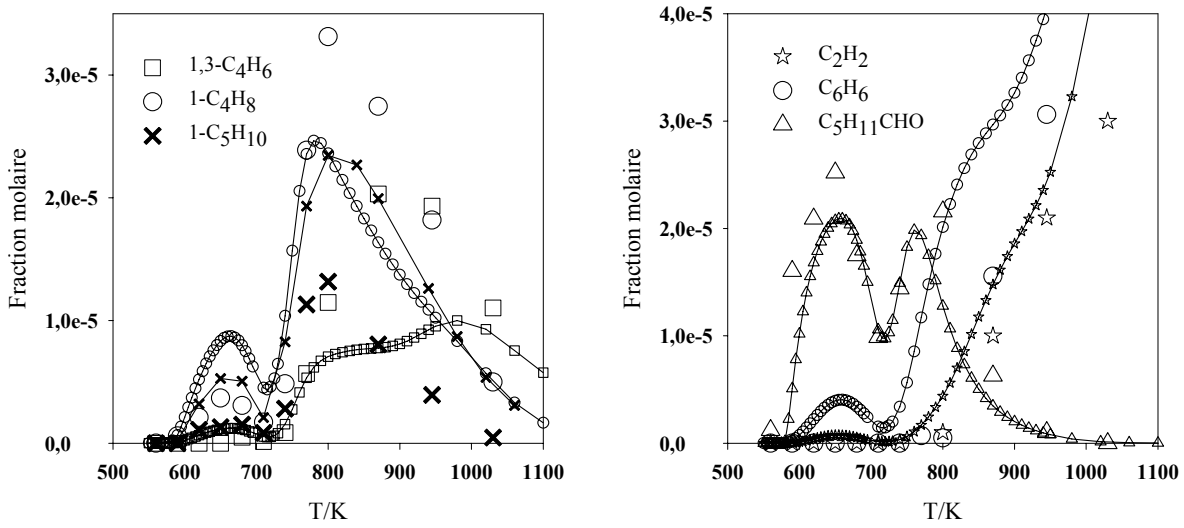


Figure V.28: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,77%; X_{N2}=99,13% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0362% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0233% ; $X_{butylbenzène}$=0,0370% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0144% ; X_{O2}=0,75% ; X_{N2}=99,14%

Le modèle simule correctement les trois régimes d'oxydation. L'allure des profils de concentrations est globalement bien simulée. Le carburant réagit bien à basse température. Cela se traduit par une baisse de la concentration de l'hexan-1-ol et par la formation de produits de combustion tels que CO et CO_2. La chute de la réactivité est visible sur les profils de l'hexan-1-ol, du monoxyde de carbone, du formaldéhyde et de l'eau au-delà de 650 K environ. En effet le coefficient négatif de température apparaît alors avec un ralentissement de la consommation de l'hexan-1-ol et par une diminution des quantités formées de CO, CO_2, CH_2O et H_2O. Une reprise de la réactivité est visible dans le domaine de haute température (T>700 K). La consommation de l'hexan-1-ol est bien représentée par la simulation dans tout le domaine de température (560≤ T (K) ≤1030). Les quantités d'hexanal sont aussi bien reproduites par le modèle, surtout en milieu riche (Φ=2).

Les espèces majoritaires détectées sont en général bien simulées par le modèle. Par contre le formaldéhyde n'est pas bien représenté à basse température quelque soit la richesse. En effet on observe une surestimation des concentrations par le modèle pour des températures

comprises entre 650 et 740 K. Nous observons un meilleur accord entre l'expérience et le modèle en milieu riche.

5.3.1.4 Analyse de sensibilité

Le mécanisme développé pour la simulation de l'oxydation du bio kérosène (kérosène/hexan-1-ol) reproduisant assez bien les résultats expérimentaux, nous avons effectué une analyse de sensibilité sur le dioxyde de carbone en milieu pauvre et à 10 atm. Cette étude va nous permettre d'identifier les réactions les plus sensibles pour la formation (coefficient positif) et la disparition (coefficient négatif) du CO_2.

Les coefficients de sensibilités pour le CO_2 lors de l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1/hexan-1-ol (90/10 en masses) en réacteur auto-agité à T=650K, à 10 atm et à Φ=0,5 sont présentées ci-dessous.

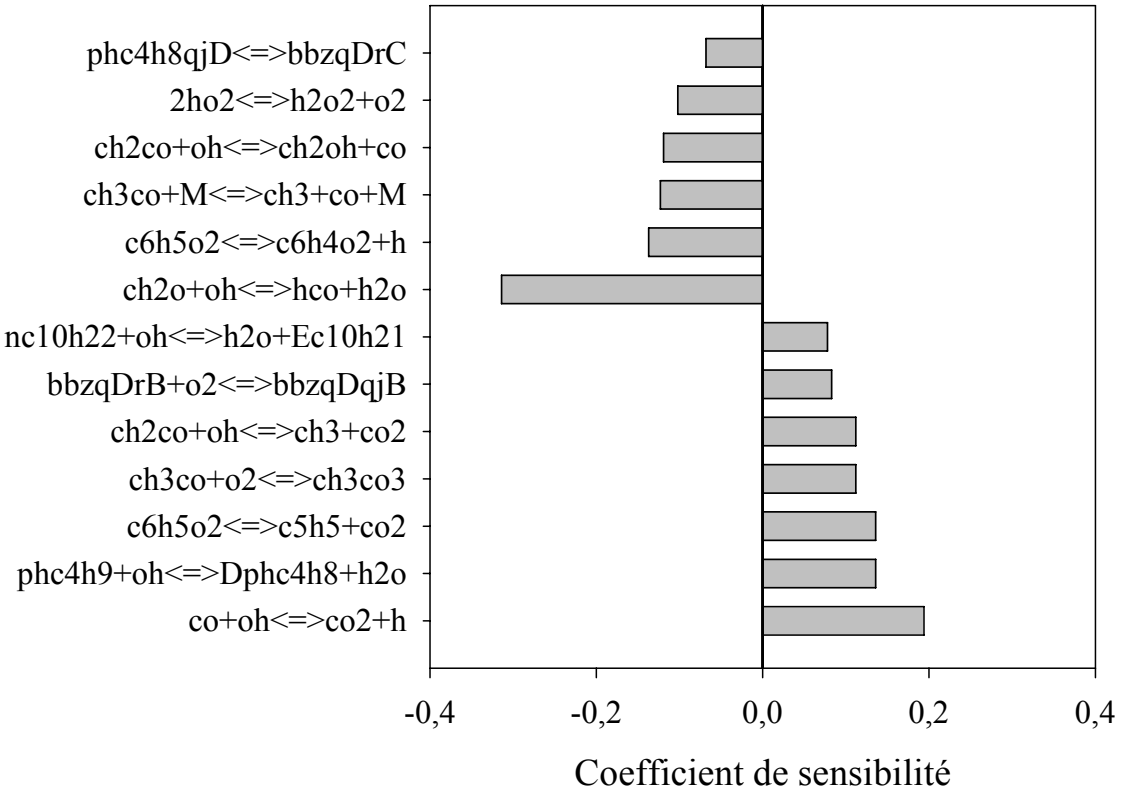


Figure V.29: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=0,5, P=10 atm)

Les réactions les plus sensibles pour la formation de CO_2 à basse température sont la réaction d'oxydation du monoxyde de carbone (co + oh ⇌ co2 + h, avec un S = 0,194) et les réactions de métathèse entre le butylbenzène et le radical hydroxyle pour former les radicaux 1-phényl-4-butyle (phc4h9 + oh ⇌ Dphc4h8 + h2, avec S = 0,136). Une autre réaction influençant la production de dioxyde de carbone est celle menant directement à la formation de CO_2 (c6h5o2 ⇌ c5h5 + co2, avec S = 0,137). La réaction ch2co + oh ⇌ ch3 + co2 (S = 0,112) vient concurrencer la réaction ch2co + oh ⇌ ch2oh + co (S = -0,119).

Comme lors de l'oxydation du kérosène pur, la réaction entre le formaldéhyde et le radical hydroxyle est celle qui diminue le plus la formation de dioxyde de carbone (ch2o + oh ⇌ hco +h2o, avec un coefficient de sensibilité S = -0,314). La réaction c6h5o2 ⇌ c6h4o2 + h (S = -0,137) limite la production de dioxyde de carbone. En effet cette dernière réaction s'oppose directement la réaction de formation de CO_2 via la réaction c6h5o2 ⇌ c5h5 + co2.

Les résultats de l'analyse de sensibilité à haute température (Φ=0,5 ; T=1030 K) sont présentés sur la Figure V.30.

Tout comme lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1 (100%), les réactions qui favorisent le plus la formation du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10 en masses) sont les réactions co + oh ⇌ co2 + h, avec un coefficient de sensibilité S = 0,326 et h + o2 ⇌ oh +o, avec S = 0,198.

De la même manière que lors de l'oxydation du Jet A-1 classique la réaction qui inhibe le plus la formation de CO_2 est la réaction de consommation des radicaux OH, ho2 + oh ⇌ h2o + o2 avec un coefficient de sensibilité négatif, S = -0,193. De même, la réaction tri-moléculaire h + o2 + M ⇌ ho2 + M (avec S = -0,109) a aussi une influence importante sur la formation du CO_2.

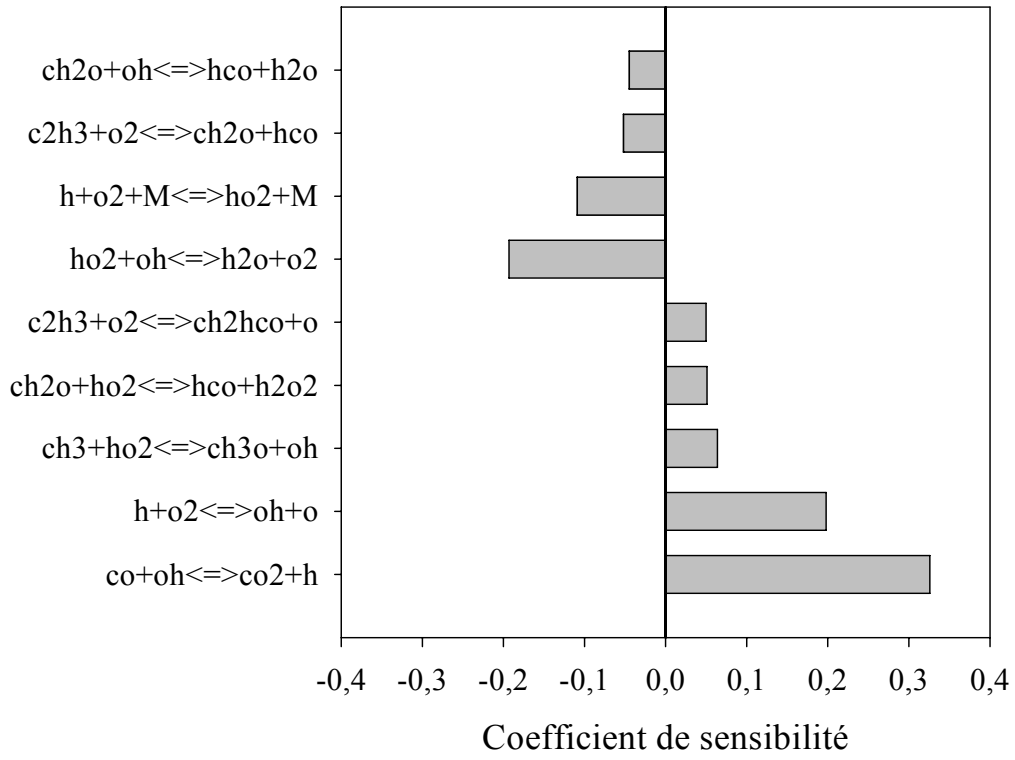


Figure V.30: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=0,5, P=10 atm)

5.3.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10 en masse) à Φ = 1

Une étude comparative a été effectuée entre l'oxydation d'un carburéacteur conventionnel (kérosène Jet A-1) et d'un kérosène alternatif (bio-kérosène). Nous avons étudié l'influence de l'ajout d'alcool (hexan-1ol) dans le kérosène Jet A-1 sur la réactivité mais aussi sur la formation des espèces pendant l'oxydation des carburants.

5.3.2.1 Réactivité

Les figures suivantes présentent les profils de concentrations du monoxyde de carbone et du formaldéhyde en fonction de la température du milieu lors de l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 et du mélange kérosène/hexan-1-ol (90/10, m/m).

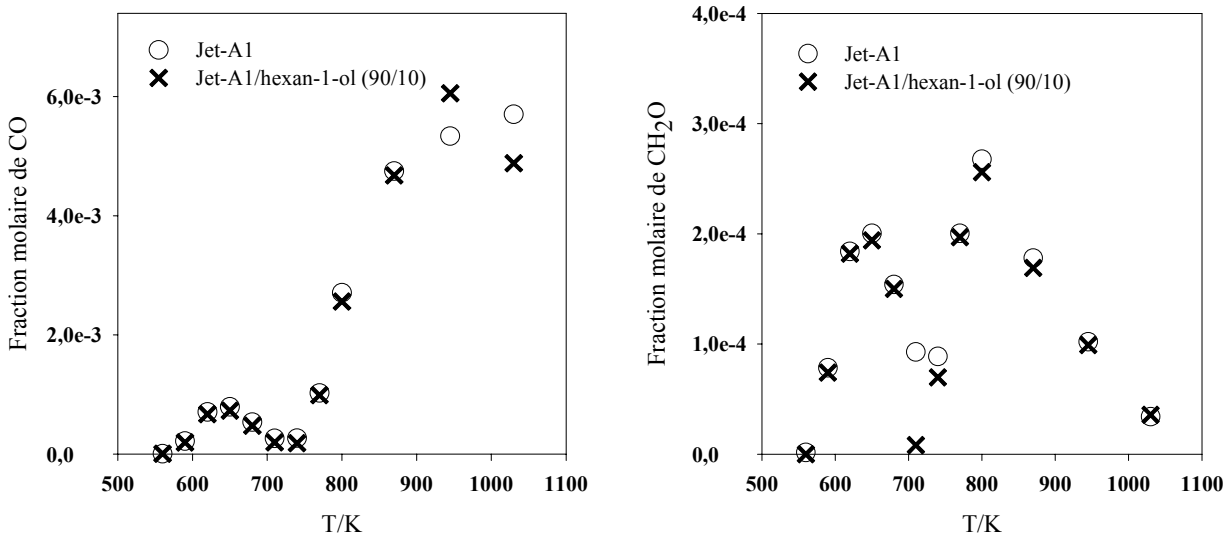


Figure V.31: Oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/hexanol (90/10, m/m) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

On observe une réactivité similaire entre les deux carburants. Les quantités de CO et de CH_2O formées sont équivalentes lors de nos deux expériences d'oxydation. L'ajout de 10% massique d'hexan-1-ol n'a donc pas d'effet notable sur la réactivité du carburéacteur.

5.3.2.2 Espèces formées lors des oxydations

Nous avons comparé l'évolution des principales espèces formées lors des oxydations du kérosène classique et du kérosène reformulé entre 560 et 1030 K, en milieu stœchiométrique et à haute pression (10 atm). Les fractions molaires maximales des principaux polluants et imbrûlés sont indiquées sur le tableau suivant (avec $X_{carburant}$=0,1%).

HC / Imbrûlé	Jet A-1	Jet A-1/hexan-1-ol
CH_4 X_{max} (T_{max})	321 (870K)	282 (870K)
C_2H_4 X_{max} (T_{max})	530 (870K)	503 (870K)
1,3-C_4H_6 X_{max} (T_{max})	12 (870K)	10,3 (870K)
CH_3CHO X_{max} (T_{max})	64 (620K) 83 (800K)	68,8 (650K) 81,1 (800K)

Tableau V.9: Fractions molaires maximales (X/ppm) des principaux polluants et imbrûlés émis à Φ=1

La comparaison des résultats a révélé une grande similarité entre les concentrations des principaux polluants et imbrûlés formés lors de nos expériences à la stœchiométrie. Par conséquent l'ajout d'hexan-1-ol (10%, en masse) n'a pas d'influence majeure sur la formation de la plupart des espèces intermédiaires stables. Ce n'est pas le cas pour l'hexanal issu de l'oxydation de l'hexan-1-ol, qui n'a été mesuré que lorsque le carburant contenait de l'hexan-1-ol.

5.3.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du bio-kérosène Jet A-1 / RME (90/10, m/m)

Pour poursuivre notre étude sur les carburants reformulés destinés au secteur aéronautique, nous avons étudié l'oxydation d'un mélange de kérosène conventionnel et de RME (esters méthylique d'huile de colza) en réacteur auto-agité. Les donnés expérimentales seront par la suite utilisées pour valider le mécanisme cinétique élaboré pour l'oxydation des mélanges kérosène/RME.

5.3.3.1 Conditions expérimentales

Le mélange kérosène Jet A-1/RME (90/10, en masses) a été oxydé en réacteur auto-agité dans un large domaine de températures (entre 560 et 1030 K), à haute pression (10 atm), à

différentes richesses (Φ = 0,5 ; 1 et 2) et à un temps de passage constant (τ =1 s). Les caractéristiques physico-chimiques de mélange sont les suivantes:

- formule chimique $C_{11,40}H_{22,63}O_{0,11}$
- masse molaire M = 161,26 $g.mol^{-1}$
- masse volumique ρ = 0,813 $g.cm^{-3}$
- coefficient stœchiométrique Z = 17

Les conditions expérimentales utilisées pour l'oxydation du mélange en réacteur auto-agité sont résumées sur le tableau suivant.

Température (K)	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	**richesse**
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$3,400.10^{-2}$	$9,650.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,700.10^{-2}$	$9,820.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1,0.10^{-3}$	$8,500.10^{-3}$	$9,905.10^{-1}$	2

Tableau V.10: Conditions expérimentales pour l'oxydation du mélange kérosène/RME (90/10, m/m) en JSR

5.3.3.2 Résultats expérimentaux

Nos moyens d'analyse nous ont permis d'identifier et quantifier une quinzaine d'espèces lors de l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1/RME (90/10, en masses). Les principaux composés détectés sont le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, l'hydrogène, l'eau, l'éthylène, le méthane, le propène, le but-1-ène, le buta-1,3-diène, le pent-1-ène, l'acétylène et le benzène. D'autres espèces telles que l'éthane et l'hex-1-ène ont été identifiées en très faibles quantités.

5.3.3.3 Confrontation expérience-modèle

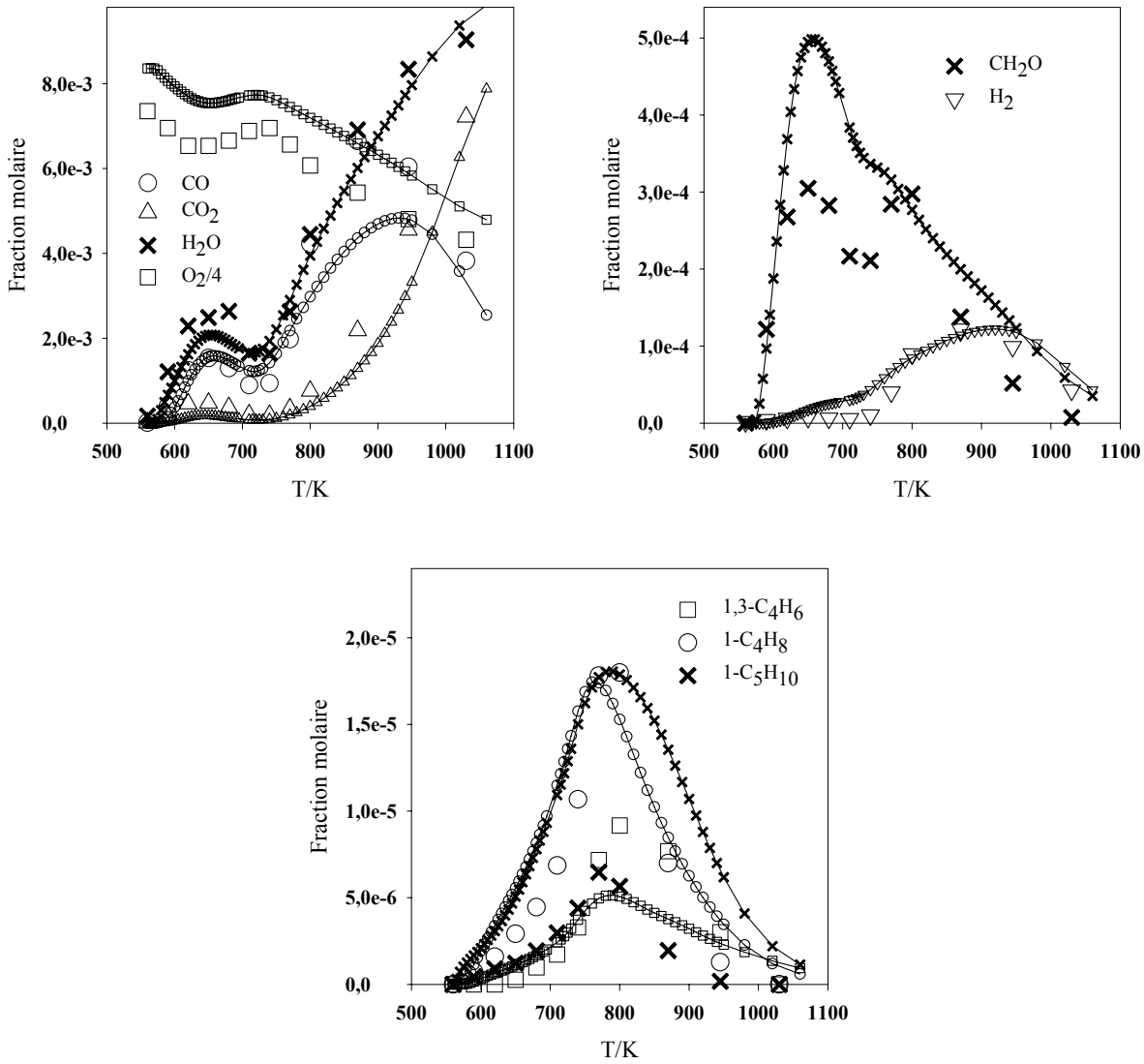


Figure V.32: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,4% ; X_{N2}=96,50% ; carburant-modèle :$X_{décane}$=0,0454% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ;$X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{methyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=3,34% ; X_{N2}=96,54%

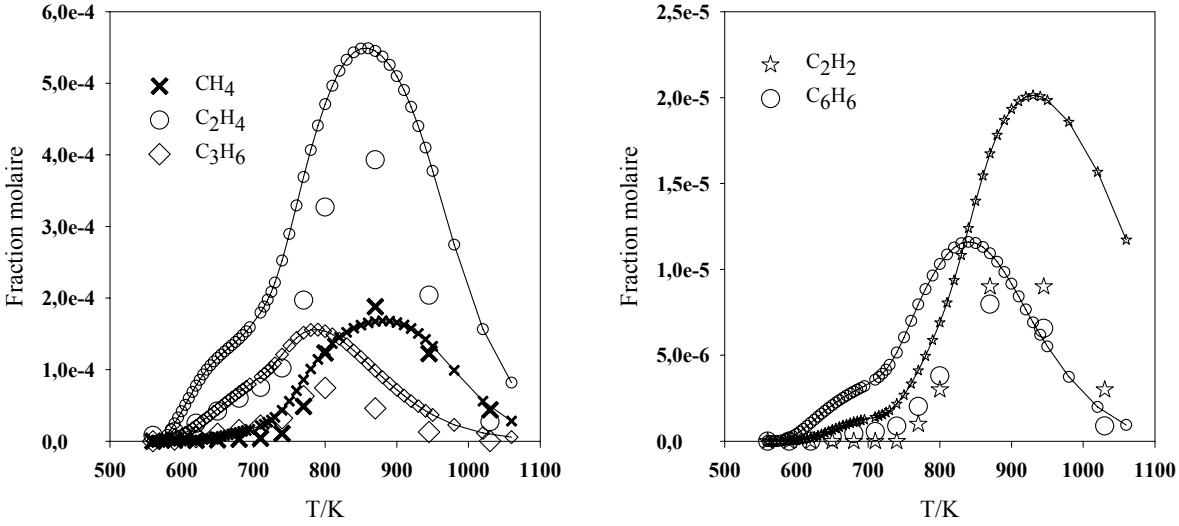


Figure V.32: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,4% ; X_{N2}=96,50% ; carburant-modèle :$X_{décane}$=0,0454% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ; $X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{méthyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=3,34% ; X_{N2}=96,54%

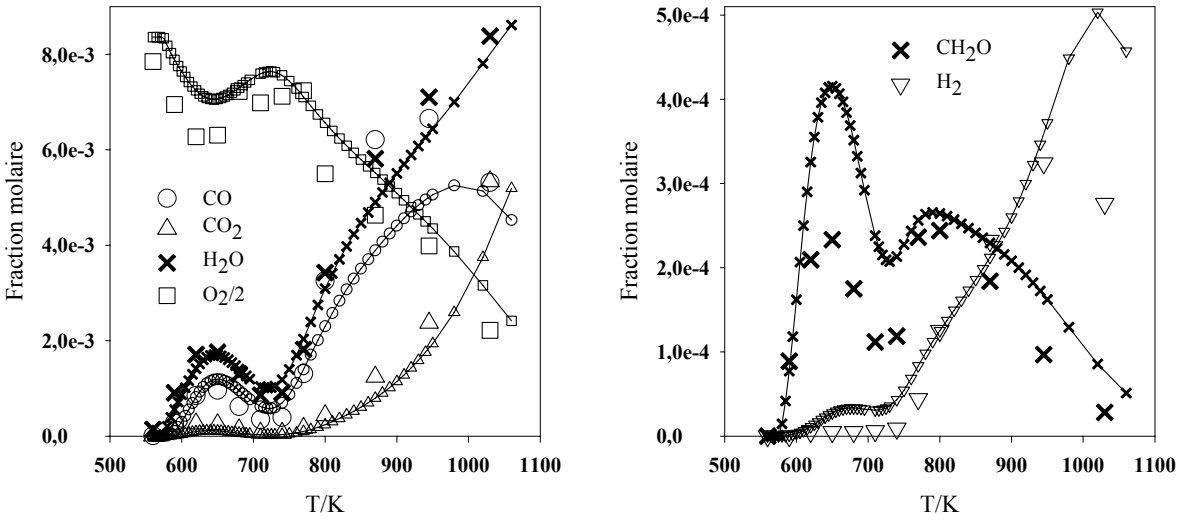


Figure V.33: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,20% ; carburant-modèle :$X_{décane}$=0,0454% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ; $X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{méthyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=1,67% ; X_{N2}=98,21%

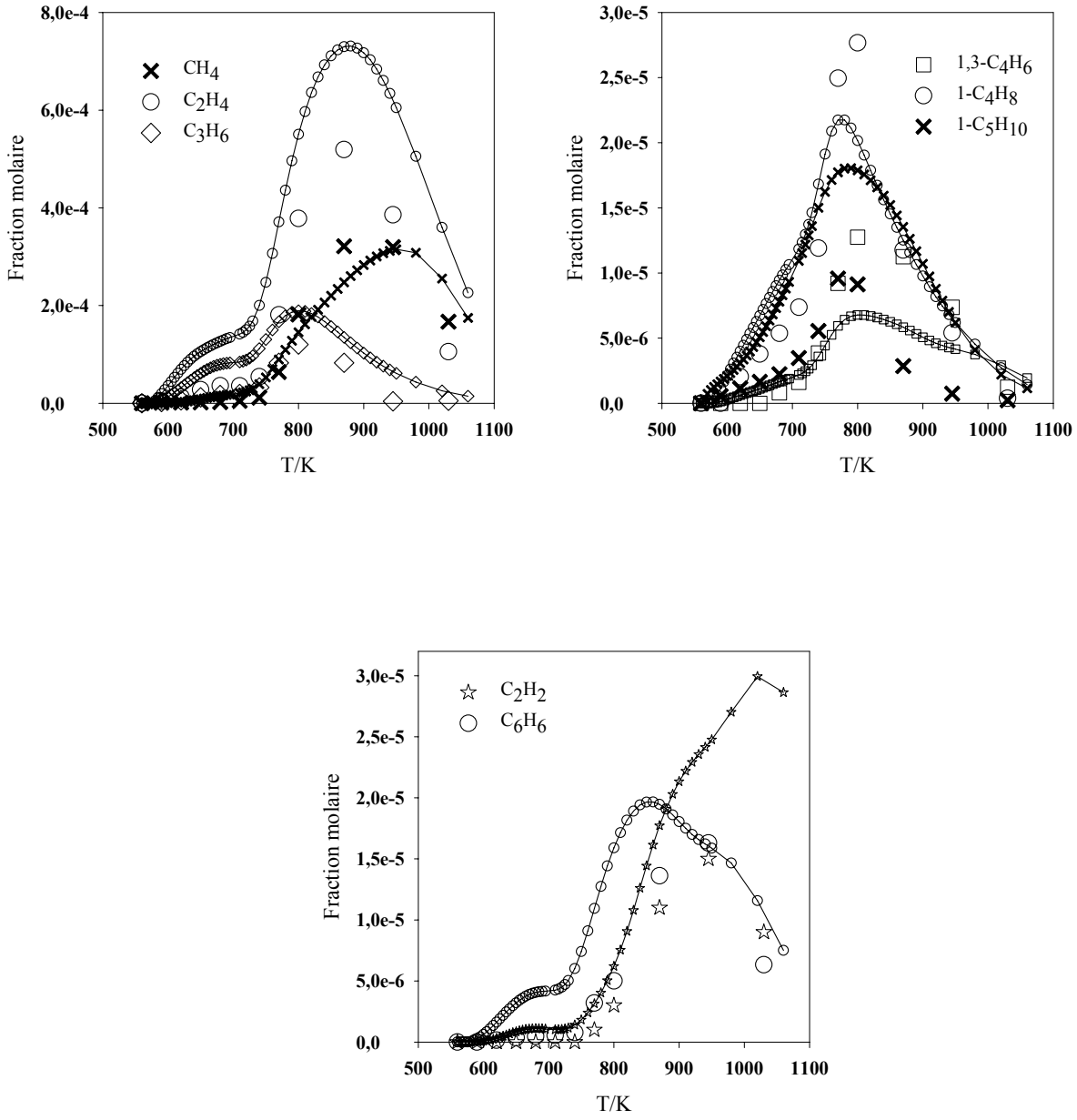


Figure V.33: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ;

X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,7% ; X_{N2}=98,20% ; carburant-modèle :$X_{décane}$=0,0454% ;

$X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ;

$X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{méthyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=1,67% ; X_{N2}=98,21%

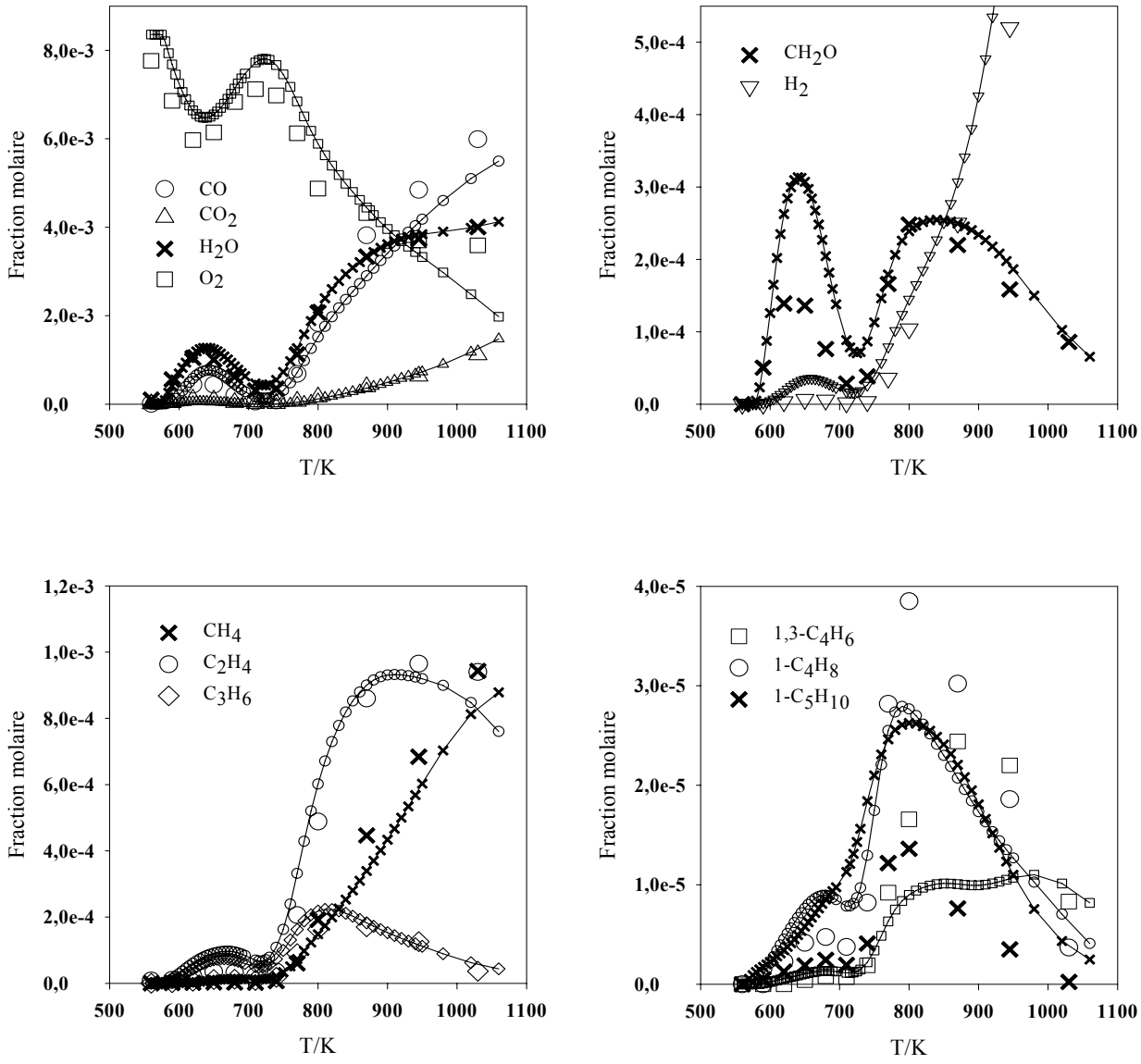


Figure V.34: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ;

X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,85% ; X_{N2}=99,05% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0454% ;

$X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ; $X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{méthyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=0,84% ; X_{N2}=99,05%

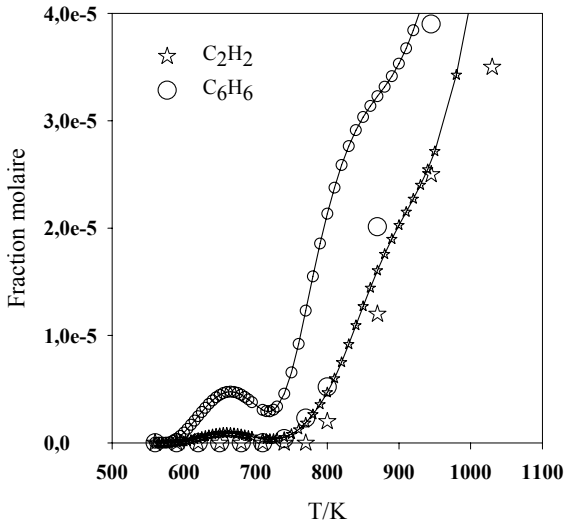


Figure V.34: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,85% ; X_{N2}=99,05% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0454% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0258% ; $X_{butylbenzène}$=0,0409% ; $X_{méthyloctanoate}$=0,0055% ; X_{O2}=0,84% ; X_{N2}=99,05%

Globalement, les profils de concentration issus de la modélisation sont en accord avec les profils expérimentaux. Les espèces majoritaires sont bien représentées par le modèle quelque soit la richesse du milieu (Φ=0,5, 1 et 2). En effet les quantités de monoxyde de carbone, de dioxyde de carbone, d'hydrogène, d'eau, de méthane et de propène sont bien simulées. Cependant l'éthylène est surestimé en milieu pauvre et à la stœchiométrie mais bien représenté en milieu riche. Le formaldéhyde est surestimé dans la zone du coefficient négatif de température (entre 620 et 710 K) mais bien reproduit à des températures plus élevées.

5.3.3.4 Analyse de sensibilité

Le mécanisme cinétique développé pour l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1/RME simulant correctement les résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité, nous avons effectué des calculs cinétiques pour identifier les réactions auxquelles les concentrations de

dioxyde de carbone calculées sont les plus sensibles. Une analyse de sensibilité à Φ=0,5 pour CO_2 a été réalisée à basse et haute température (respectivement 650 et 1030 K).

Les résultats de l'analyse de sensibilité à basse température (à Φ=0,5 ; T=650 K) sont présentés sur la Figure V.35. A cette température la réaction influençant le plus la formation du dioxyde de carbone est la réaction co + oh ⇌ co2 + h, avec un coefficient de sensibilité S = 0,187. La réaction de métathèse du butylbenzène avec le radical hydroxyle favorise aussi la production de CO_2 (phc4h9 + oh ⇌ Dphc4h8 + h2o, avec S = 0,129). La réaction ch2co + ch3o ⇌ me2j (S = 0,66) joue également un rôle dans la formation du dioxyde de carbone.

La réaction qui limite le plus la formation de CO_2 est la réaction entre le formaldéhyde et le radical OH avec un coefficient de sensibilité négatif S = -0,276. La réaction ch2co + oh ⇌ ch2oh + co (S = -0,126) s'oppose directement à la réaction ch2co + oh ⇌ ch3 + co2 (S = 0,90)

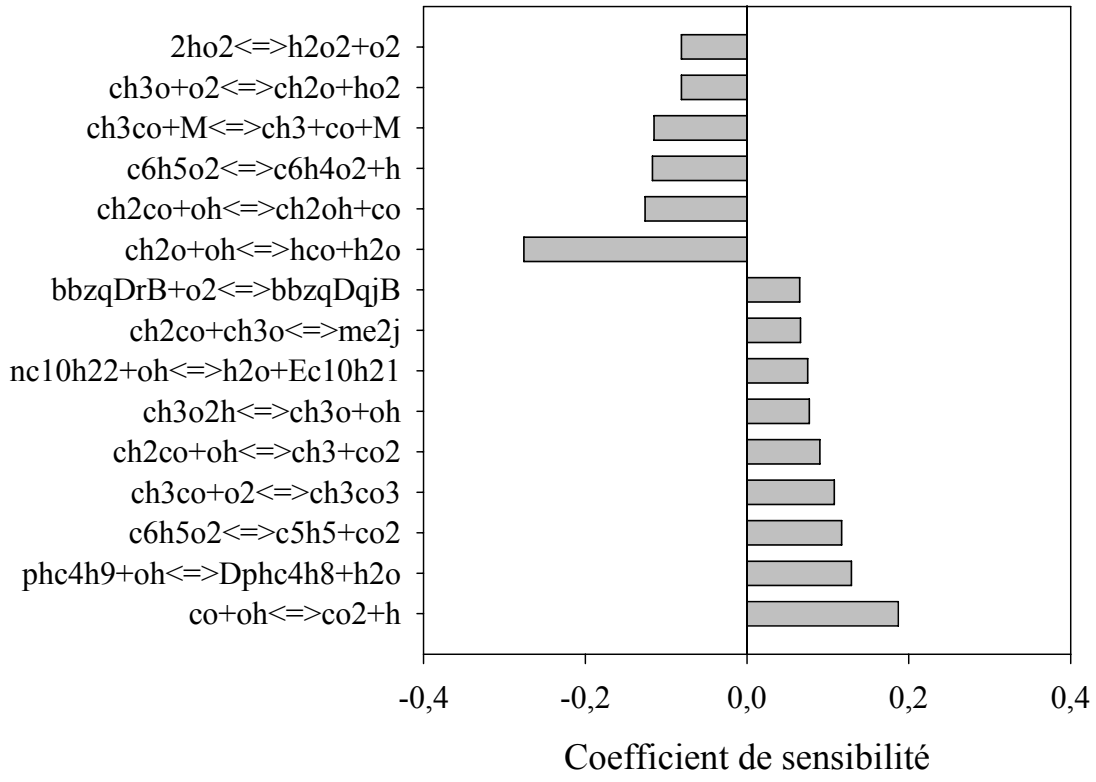


Figure V.35: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=0,5, P=10 atm)

Les résultats des études de sensibilité menées pour le CO_2 lors de l'oxydation du mélange kérosène/RME (90/10, en masses) à Φ=0,5 et à T=1030 K sont présentés sur la figure suivante (Figure V.36). A 1030 K les réactions qui favorisent la production de CO_2 sont les réactions co + oh ⇌ co2 + h (avec S = 0,316) et h + o2 ⇌ oh + o (S= 0,187). D'autres réactions ont également un impact sur la production de CO_2 mais avec des coefficients moins importants.

Par contre la réaction entre les radicaux HO_2 et OH produisant de l'eau et de l'oxygène nuit à la formation de CO_2. Cette réaction a un coefficient de sensibilité négatif S = -0,187. La réaction trimoléculaire h + o2 + M ⇌ ho2 + M (S = -0,106) limite également la formation de dioxyde de carbone à haute température. Outre ces réactions, ont remarque aussi d'autres réactions telle que la réaction c2h3 + o2 ⇌ ch2o + hco (S = -0,051) qui concurrence la réaction c2h3 + o2 ⇌ ch2hco + o (S = 0,048).

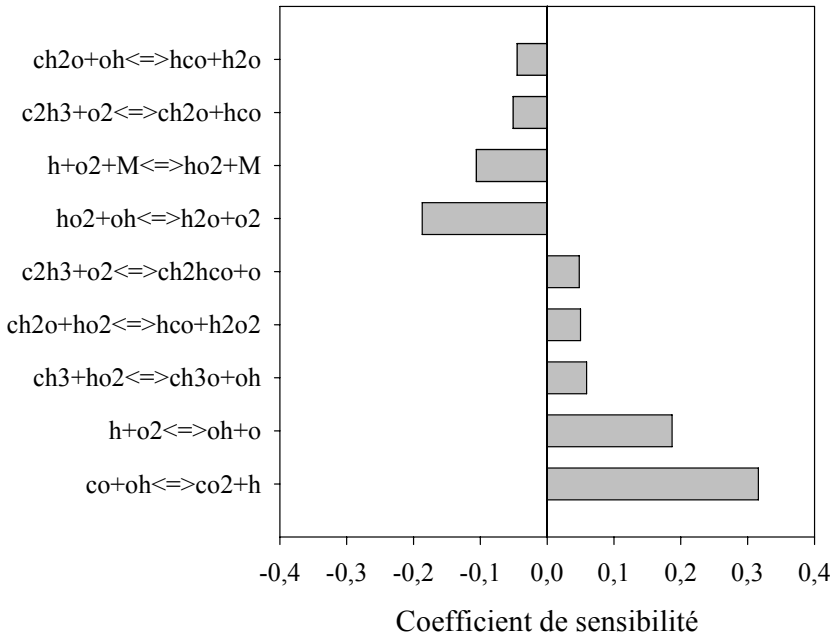


Figure V.36: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=0,5, P=10 atm)

5.3.4 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1 / RME (90/10 en masse) à Φ = 1

Ce travail nous a permis de comparer l'oxydation d'un kérosène conventionnel à celle d'un kérosène reformulé. Le kérosène conventionnel et le kérosène reformulé utilisés sont respectivement le Jet A-1 et le mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m).

5.3.4.1 Réactivité

Dans un premier temps nous avons effectué une comparaison entre la réactivité du kérosène Jet A-1 et celle du mélange kérosène/RME. Pour illustrer cette comparaison, nous avons tracé les profils de concentration du monoxyde de carbone et du formaldéhyde en fonction de la température, à Φ=1 pour les deux expériences d'oxydations. Les profils de concentrations sont présentés ci-dessous.

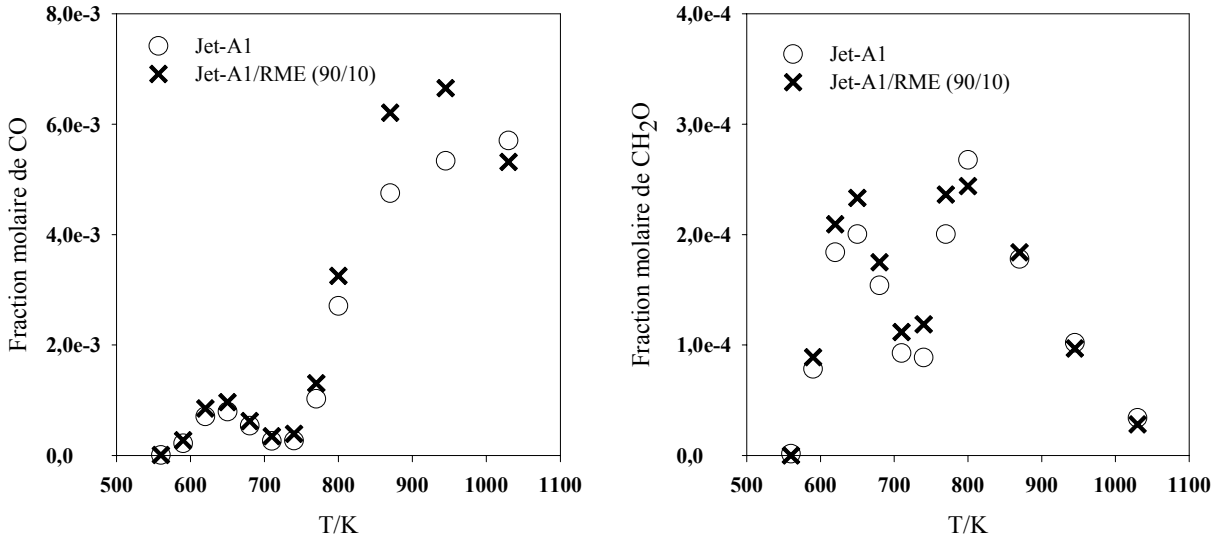


Figure V.37: Oxydation du kérosène Jet A-1 et du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

Les profils de CO et CH_2O observés sont pratiquement identiques durant les deux expériences d'oxydation. L'ajout d'esters (10%) n'a pas d'effet majeur sur la réactivité du carburéacteur. Les deux systèmes présentent le même comportement.

5.3.4.2 Espèces formées lors des oxydations

Pour comparer l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 et du kérosène reformulé (mélange kérosène/RME (90/10, m/m)), nous avons aussi observé l'évolution des principaux imbrûlés formés lors des deux expériences à Φ=1, P=10 atm, $X_{carburant}$=0,1% et avec τ=1 s.

Les fractions molaires maximales du méthane, de l'éthylène et du buta-1,3-diène mesurées pendant les expériences sont présentées dans le tableau ci-dessous.

HC / Imbrûlé	Jet A-1	Jet A-1/RME
CH_4 X_{max} (T_{max})	321 (870K)	320 (870K)
C_2H_4 X_{max} (T_{max})	530 (870K)	520 (870K)
1,3-C_4H_6 X_{max} (T_{max})	12 (870K)	12,7 (870K)

Tableau V.11: Fraction molaires maximales (X/ppm) des principaux polluants et imbrûlés émis à Φ=1,

Lors des expériences, quelque soit le carburant, chaque polluant est émis à son maximum à des températures proches. Par ailleurs, les concentrations maximales émises pour chaque polluant lors de nos expériences sont similaires.

Les résultats obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation du kérosène conventionnel Jet A-1 et de kérosènes alternatifs issus de la biomasse tels que les mélanges massique Jet A-

1/hexa-1-ol (90/10) et Jet A-1-RME (90/10) nous ont permis de conclure que l'ajout d'additifs (10%) n'a pas d'effet notable sur la réactivité et sur la formation des espèces principales.

5.4 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation de kérosènes de synthèse

Outre les études effectuées sur l'oxydation des bio-kérosène (mélange kérosène/hexan-1-ol et mélange kérosène/ester méthylique d'huile de colza), nous avons aussi mené des études expérimentales en réacteur auto-agité sur l'oxydation de carburéacteurs de synthèse produit par la synthèse Fischer-Tropsch. Nous avons donc étudié l'oxydation de plusieurs carburants synthétiques (SPK (IFP), GTL (Shell), CTL (Sasol) et des mélanges kérosène/SPK (IFP) (50/50 en masse) et GTL/hexan-1-ol (80/20 en volume).

Le tableau ci-dessous (Tableau V.12) résume les expériences réalisées en réacteur auto-agité avec les kérosènes de synthèse.

Carburant	Formule Brute	M (g/mol)	Z	P (atm)	τ (s)	T (K)	richesse	X_{HC}
SPK (IFP)	$C_{11,5}H_{24,41}$	162,41	17,60	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
Jet A-1/SPK (IFP)	$C_{11,24}H_{23,17}$	158,05	17,03	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
GTL (Shell)	$C_{10,45}H_{23,06}$	148,44	16,215	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
CTL (Sasol)	$C_{11,06}H_{21,6}$	154,32	16,46	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
GTL(Shell)/hexan-1-ol	$C_{9,17}H_{20,45}O_{0,29}$	135,13	14,14	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%

Tableau V.12: Récapitulatif des études menées sur le kérosène de synthèse en JSR

5.4.1 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation d'un kérosène de synthèse SPK pur, SPK (IFP)

Cette section présente les résultats obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation d'un kérosène de synthèse (Synthetic Paraffinic Kerosene).

5.4.1.1 Conditions expérimentales

Le réacteur auto-agité nous a permis d'étudier l'oxydation du kérosène de synthèse SPK ($C_{11,5}H_{24,41}$; M = 162,41 g.mol^{-1} ; ρ = 0 ,76 g.cm^{-3}) dans un large domaine de températures (entre 560 et 1030 K), à haute pression (10 atm), à trois richesses (Φ = 0,5, 1 et 2) et à un temps de passage maintenu constant (τ=1 s).

Les conditions expérimentales utilisées lors de l'oxydation de ce kérosène de synthèse en réacteur auto-agité sont indiquées ci-dessous.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}52.10^{-2}$	$9{,}638.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}76.10^{-2}$	$9{,}814.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$8{,}80.10^{-3}$	$9{,}902.10^{-1}$	2

Tableau V.13: Conditions expérimentales pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK (IFP) en JSR

5.4.1.2 Résultats expérimentaux

Lors des différentes expériences menées en réacteur auto-agité sur l'oxydation du kérosène de synthèse SPK (Φ=0,5, 1 et 2), nous avons pu observer les trois régimes d'oxydation : la flamme froide, le coefficient négatif de température CNT et le domaine de haute température. Nos moyens d'analyse ont permis l'identification et la quantification d'une

vingtaine d'espèces. On a pu suivre l'évolution de la majorité des espèces issues de l'oxydation du SPK : H_2, H_2O, O_2, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6, et 1-C_5H_{10}. D'autres espèces ont été détectées en concentrations négligeables.

5.4.1.3 Confrontation expérience-modèle

Le modèle développé pour représenter l'oxydation du kérosène de synthèse (mélange tertiaire, n-décane/iso-octane/n-butylbenzène) a été choisi sur la base des résultats d'analyse du carburant et des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité. Les profils de concentrations expérimentaux et simulés des principales espèces issues de l'oxydation du SPK sont présentés sur les figures suivantes.

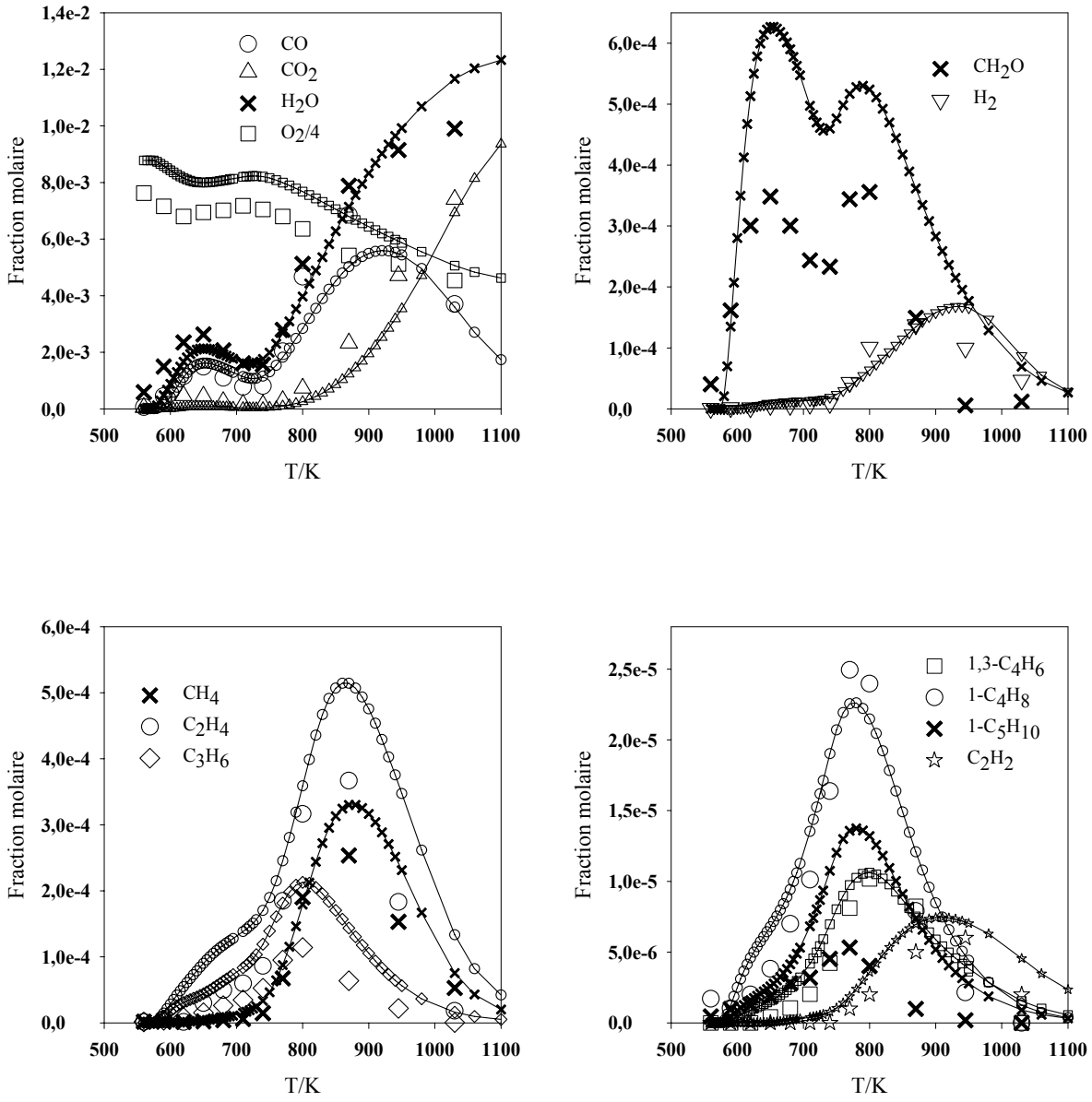


Figure V.38: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,52% ; X_{N2}=96,38% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0624% ; $X_{butylbenzène}$=0,0006% ;
$X_{iso\text{-}octane}$=0,0650% ; X_{O2}=3,51% ; X_{N2}=96,36%

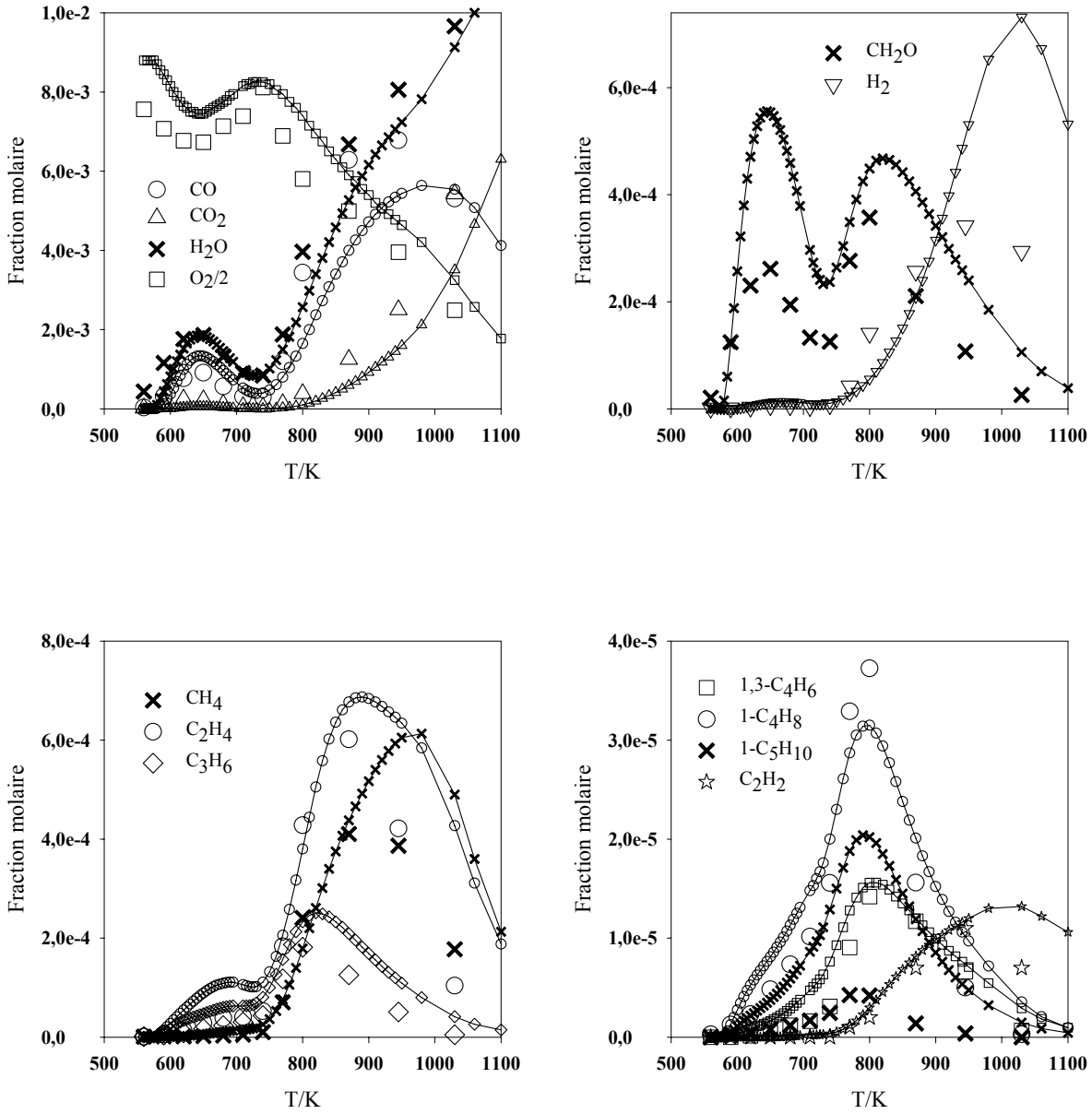


Figure V.39: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,76% ; X_{N2}=98,14% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0624% ; $X_{butylbenzène}$=0,0006% ;
$X_{iso\text{-}octane}$=0,0650% ; X_{O2}=1,76% ; X_{N2}=98,12%

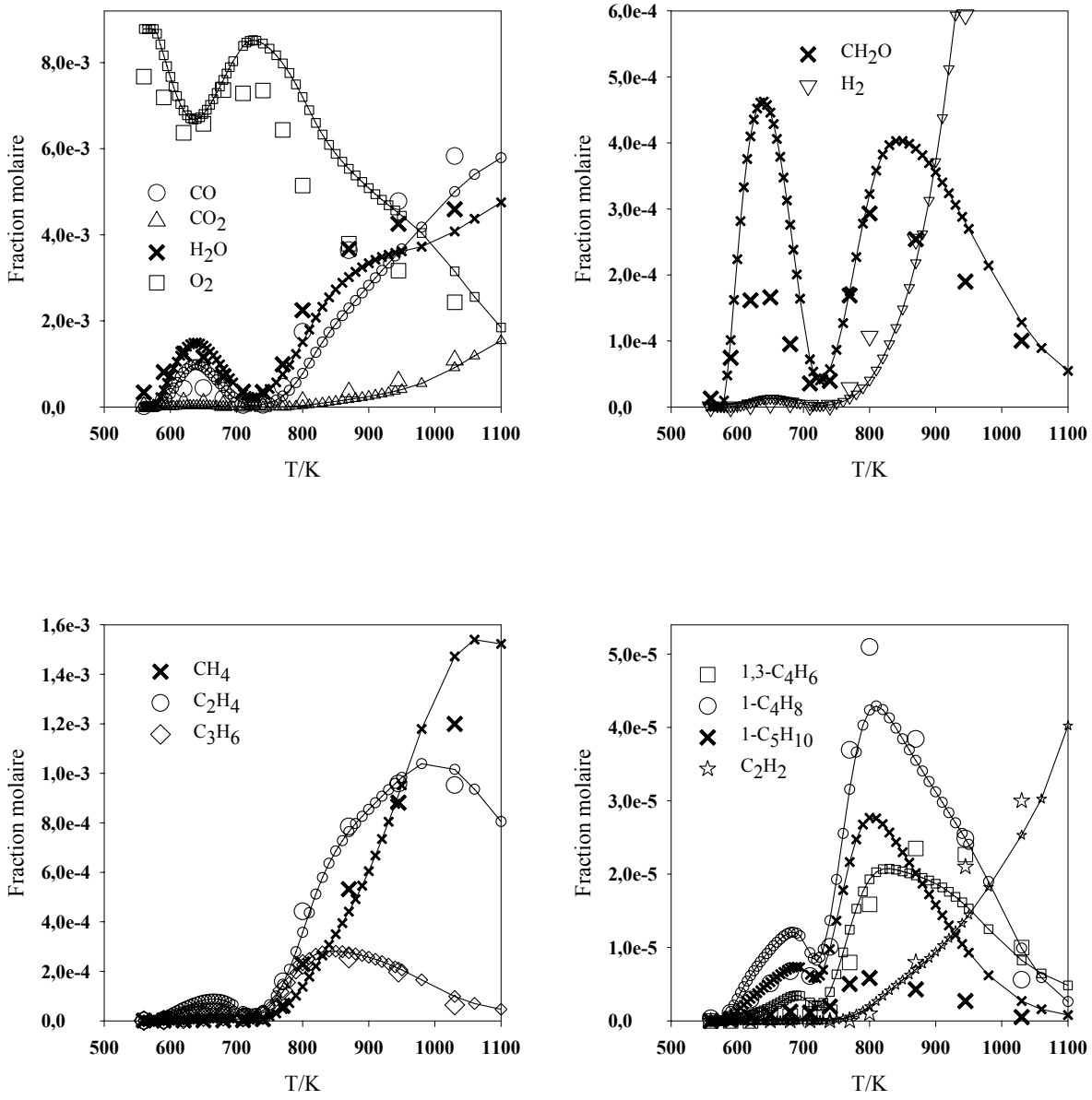


Figure V.40: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du kérosène de synthèse SPK en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,88% ; X_{N2}=99,02% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0624% ; $X_{butylbenzène}$=0,0006% ;
$X_{iso\text{-}octane}$=0,0650% ; X_{O2}=0,88% ; X_{N2}=98,99%

Le mécanisme développé reproduit correctement les profils des principales espèces issues de l'oxydation du kérosène de synthèse. Le modèle simule bien le CO, CO_2, O_2 et H_2. Cependant il surestime les quantités de formaldéhyde et de méthane. Les quantités de d'éthylène (C_2H_4) et de propène (C_3H_6) sont aussi surestimées en milieu pauvre. Par contre en

milieu riche on observe un bon accord entre les profils de concentrations expérimentaux et simulés. En effet, les quantités de C_2H_4 et C_3H_6 sont bien simulées. On remarque également un accord convenable pour 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6 et C_2H_2. Par contre les quantités de pent-1-ène sont surestimées par le modèle.

On observe une augmentation du coefficient négatif de température lorsque la concentration initiale d'oxygène diminue. Ainsi, on observe un CNT plus prononcé en milieu riche (Φ=2).

5.4.1.4 Analyse de sensibilité

On a vu précédemment que le mécanisme cinétique élaboré représente convenablement l'oxydation du kérosène de synthèse SPK. Les calculs cinétiques nous ont permis d'effectuer des études de sensibilité sur le dioxyde de carbone à basse et haute température. Ces analyses ont été menées en milieu pauvre (Φ=0,5). Il faut rappeler qu'une réaction avec un coefficient de sensibilité positif favorise la formation de CO_2 alors qu'une réaction ayant un coefficient négatif réduit sa production si sa vitesse augmente.

Les coefficients de sensibilité des réactions les plus influentes pour le dioxyde de carbone lors de l'oxydation kérosène synthétique à Φ=0,5 et à T=650 K sont présentés sur la Figure V.41.

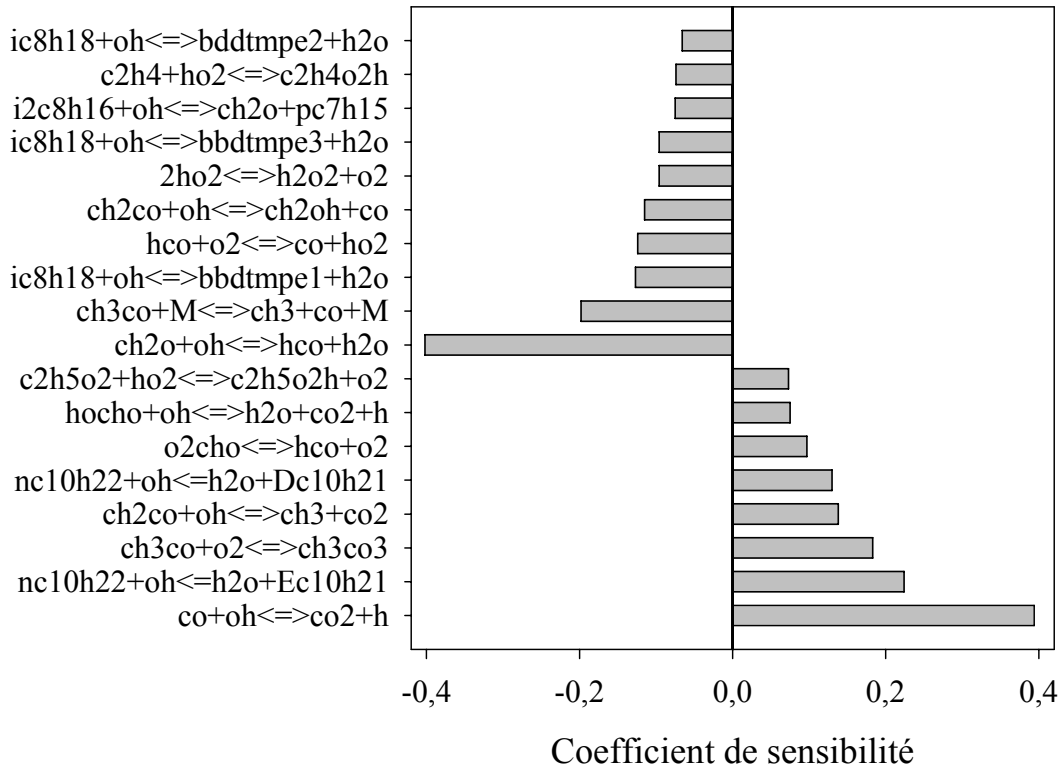


Figure V.41: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité (T=650 K, Φ=0,5, P=10 atm)

La formation de dioxyde de carbone est principalement influencée par les réactions consommant des radicaux hydroxyles. En effet la réaction d'oxydation co + oh ⇌ co2 + h a un coefficient de sensibilité positif S = 0,394. Les réactions de métathèse du décane avec les radicaux OH formant de l'eau et des radicaux décyles (4-décyle et 5-décyle) favorisent également la production de CO_2.

Les réactions qui limitent la formation du dioxyde de carbone sont en majorité les réactions de métathèse entre le formaldéhyde avec les radicaux OH et entre l'iso-octane et OH. La réaction de consommation des radicaux hydroxyles par le formaldéhyde ch2o + oh ⇌ hco + h2o a la plus grande influence avec un coefficient S = -0,402. Les réactions de métathèse entre l'iso-octane et les radicaux OH formant les radicaux 2,2,4-trimethyl-pent-1-

yl, 2,2,4-trimethyl-pent-3-yl et 2,2,4-trimethyl-pent-2-yl ont des coefficients de sensibilité respectivement égaux à -0,127, -0,096 et -0,066. D'autres réactions telle que la réaction de dismutation des radicaux hydroperoxyles 2ho2 ⇌ h2o2 + o2, avec un coefficient de sensibilité négatif S = -0,096 a une influence négative sur la formation de CO_2. Le peroxyde d'hydrogène formé est en effet stable à basse température (<800K), ce qui entraîne une réduction de la production de CO_2.

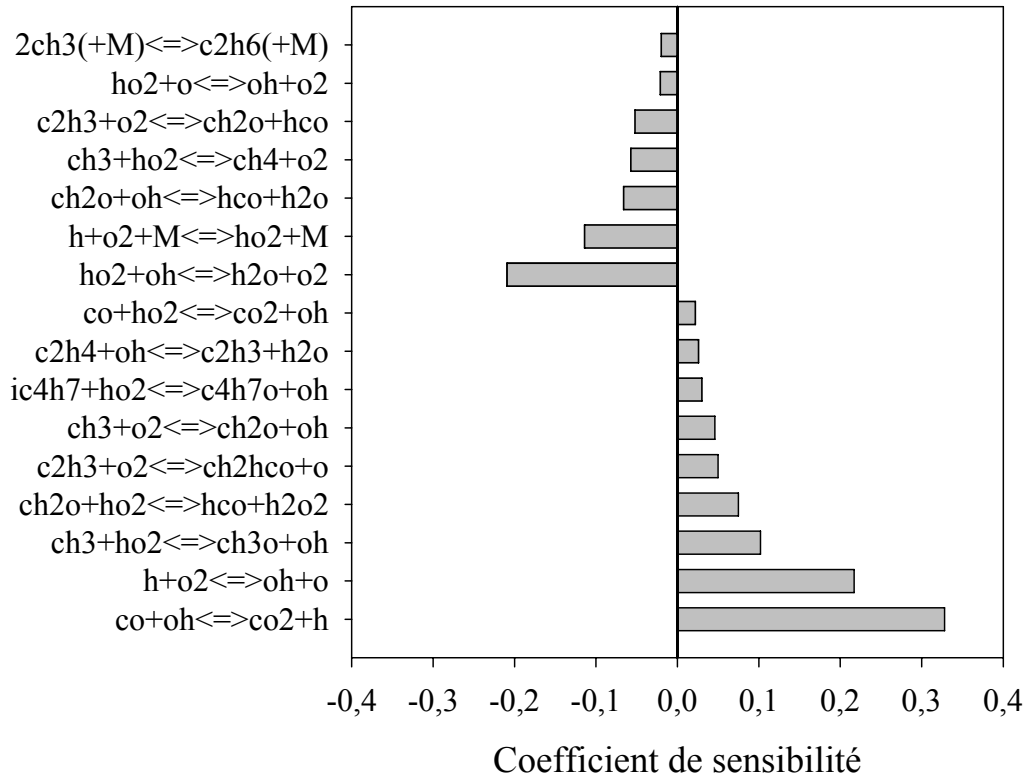


Figure V.42: Spectre de sensibilité du dioxyde de carbone lors de l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité (T=1030 K, Φ=0,5, P=10 atm)

Les résultats de l'analyse de sensibilité à haute température (à Φ=0,5 ; T=1030 K) sont présentés sur la Figure V.42. La formation de CO_2 est principalement influencé par la réaction d'oxydation du monoxyde de carbone par le radical hydroxyle (S=0,328) mais aussi par la réaction de ramification principale, h + o2 ⇌ oh + o, avec un coefficient de sensibilité S = 0,217. La réaction entre le radical méthyle et le radical hydroperoxyle influence également la formation de CO_2. Cette dernière réaction forme des radicaux OH nécessaires à la production de CO_2. La consommation des radicaux OH avec HO_2 limite fortement la formation de CO_2.

Cette réaction a un coefficient de sensibilité négatif S = -0,209. La réaction trimoléculaire, h + o2 + M ⇌ ho2 + M, avec un coefficient de sensibilité S = -0,114, diminue également la vitesse de formation du dioxyde de carbone. La formation des radicaux HO_2 moins réactifs que les radicaux OH, entraîne quand à elle une diminution de la production de CO_2.

Nous avons par la suite étudié l'évolution des coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles pour le dioxyde de carbone en fonction de la température du milieu réactionnel (entre 550 et 1100 K), en milieu pauvre (Φ=0,5) et à haute pression (10 atm). La Figure V.43 présente l'évolution des coefficients en fonction de la température.

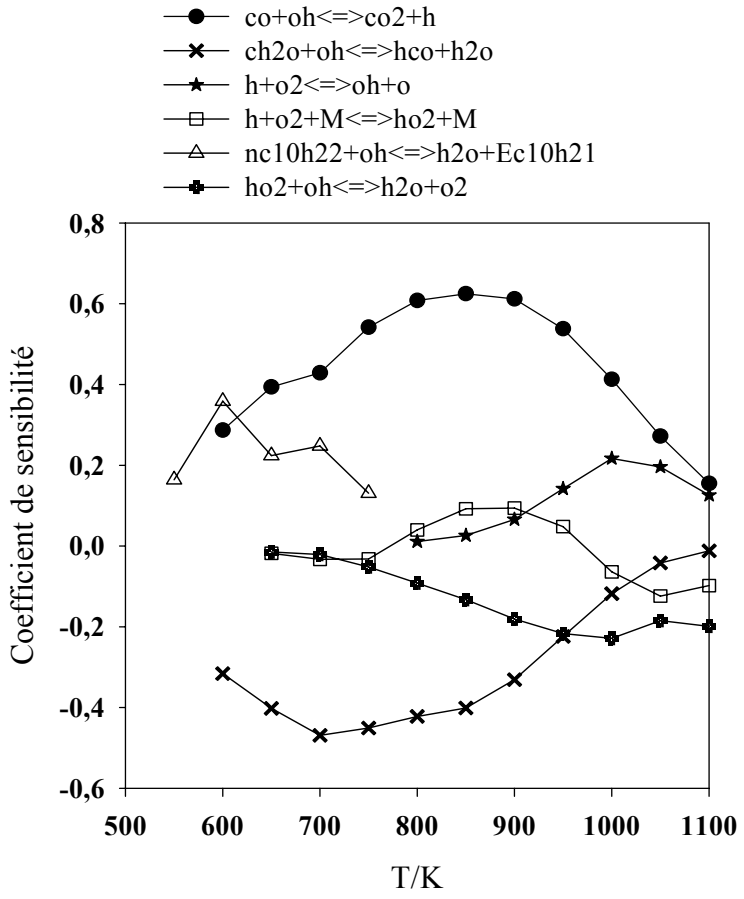


Figure V.43: Coefficient de sensibilité du dioxyde de carbone en fonction de la température lors de l'oxydation du SPK en réacteur auto-agité (Φ=0,5, P=10 atm)

Comme indiqué précédemment la réaction co + oh ⇌ co2 + h favorise la formation de CO_2. Cette réaction est très sensible pour des températures intermédiaires comprises entre 750

et 950 K. Le coefficient de sensibilité de cette réaction diminue lorsque la température augmente. La réaction de métathèse entre le n-décane et le radial hydroxyle favorise la formation du CO_2 aux faibles températures. La réaction ch2o + oh ⇌ hco + h2o limite la formation de CO_2 dans le domaine de basse température. Cependant cet effet diminue avec l'augmentation de la température (T>700 K). La réaction h+o2+M ⇌ ho2+M a une influence négative sur la formation de CO_2 pour des faibles températures. Pour des températures intermédiaires, cette trimoléculaire favorise la production de CO_2. Cette réaction à un effet inhibiteur sur la formation de CO_2 pour des températures supérieures à 950 K.

5.4.2 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et du kérosène de synthèse SPK, à Φ = 1

Nous avons comparé les concentrations des principales espèces formées lors des oxydations du kérosène commercial Jet A-1 et du kérosène de synthèse SPK (GTL, IFP) en réacteur auto-agité, dans les mêmes conditions expérimentales à des températures comprises entre 560 et 1030 K, à haute pression (P=10 atm), Φ=1, $X_{carburant}$=1000 ppm et τ=1 s. Les figures ci-dessous présentent cette comparaison.

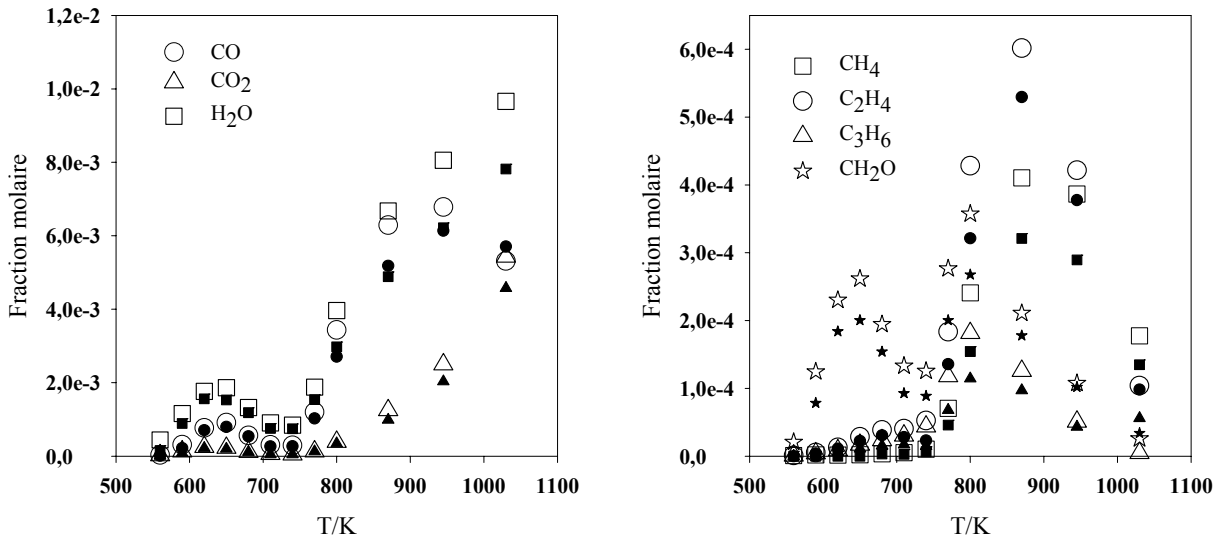


Figure V.44: Profils expérimentaux des espèces issues des oxydations du kérosène Jet A-1 (symboles pleins) et du kérosène de synthèse SPK (symboles vides) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

On remarque des profils de concentrations similaires pour le CO, CO_2 et H_2O dans le domaine de la flamme froide et du CNT. Cependant pour des températures plus élevées, l'oxydation du kérosène de synthèse SPK forme plus de CO, CO_2 et H_2O. Globalement, le kérosène de synthèse s'oxyde plus rapidement que le kérosène conventionnel. On observe également une production plus élevée des espèces intermédiaires stables CH_2O, CH_4, C_2H_4 et C_3H_6 lors de l'oxydation du kérosène de synthèse. La forte présence de paraffines dans le carburéacteur de synthèse (79,9% d'iso-paraffines et 19,6% de n-paraffines, voir Tableau IV.12) entraîne une formation plus importante de C_2H_4 et C_3H_6 (par des réactions de rupture de liaisons i.e. β-scissions) que lors de l'oxydation du kérosène Jet A-1. Les quantités élevées de méthane mesurées lors de l'oxydation du SPK s'expliquent par la présence d'iso-paraffines en concentration plus élevée dans le carburéacteur synthétique.

5.4.3 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange kérosène Jet A-1 / kérosène de synthèse SPK (50/50, en masse)

Cette section présente les données expérimentales et simulées obtenues lors de l'oxydation d'un mélange binaire 50/50 massique entre un kérosène conventionnel (Jet A-1) et un kérosène de synthèse (SPK/IFP).

5.4.3.1 Conditions expérimentales

La cinétique d'oxydation d'un mélange binaire constitué en fraction massique de 50% de kérosène synthétique (SPK) et de 50% de kérosène commerciale Jet A-1 ($C_{11,24}H_{23,17}$; M = 158,05 $g.mol^{-1}$; ρ = 0 ,78 $g.cm^{-3}$) a été étudiée dans un réacteur auto-agité par jets gazeux dans un large domaine de températures (entre 560 et 1030 K), à haute pression (10 atm), à des richesses comprises entre 0,5 et 2 et à un temps de passage constant (τ=1 s).

Le tableau suivant présente les conditions expérimentales utilisées pour étudier l'oxydation du mélange kérosène de synthèse / kérosène conventionnel (SPK/Jet A-1 50/50, m/m) en réacteur auto-agité.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}41.10^{-2}$	$9{,}649.10^{-1}$	0,5
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}70.10^{-2}$	$9{,}820.10^{-1}$	1
560-1030	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$8{,}5.10^{-3}$	$9{,}905.10^{-1}$	2

Tableau V.14: Conditions expérimentales pour l'oxydation du mélange SPK/Jet A-1 (50/50, m/m) en JSR

5.4.3.2 Résultats expérimentaux

Les profils de concentrations des réactifs, produits finals et principaux intermédiaires stables ont été obtenus par prélèvements suivis d'analyses par chromatographie en phase gazeuse et IRTF. Les espèces identifiées sont similaires à celles détectées lors de l'oxydation du SPK (100%). Nous avons donc suivi l'évolution de la fraction molaire des espèces suivantes: H_2, H_2O, O_2, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6, et 1-C_5H_{10}.

5.4.3.3 Confrontation expérience-modèle

Le modèle utilisé pour représenter l'oxydation du mélange binaire (SPK/Jet A-1) est constitué de quatre composés modèles (n-décane, iso-octane, n-butylbenzène et n-propylcyclohexane). La confrontation entre les résultats expérimentaux et simulés est présentée sur les figures suivantes.

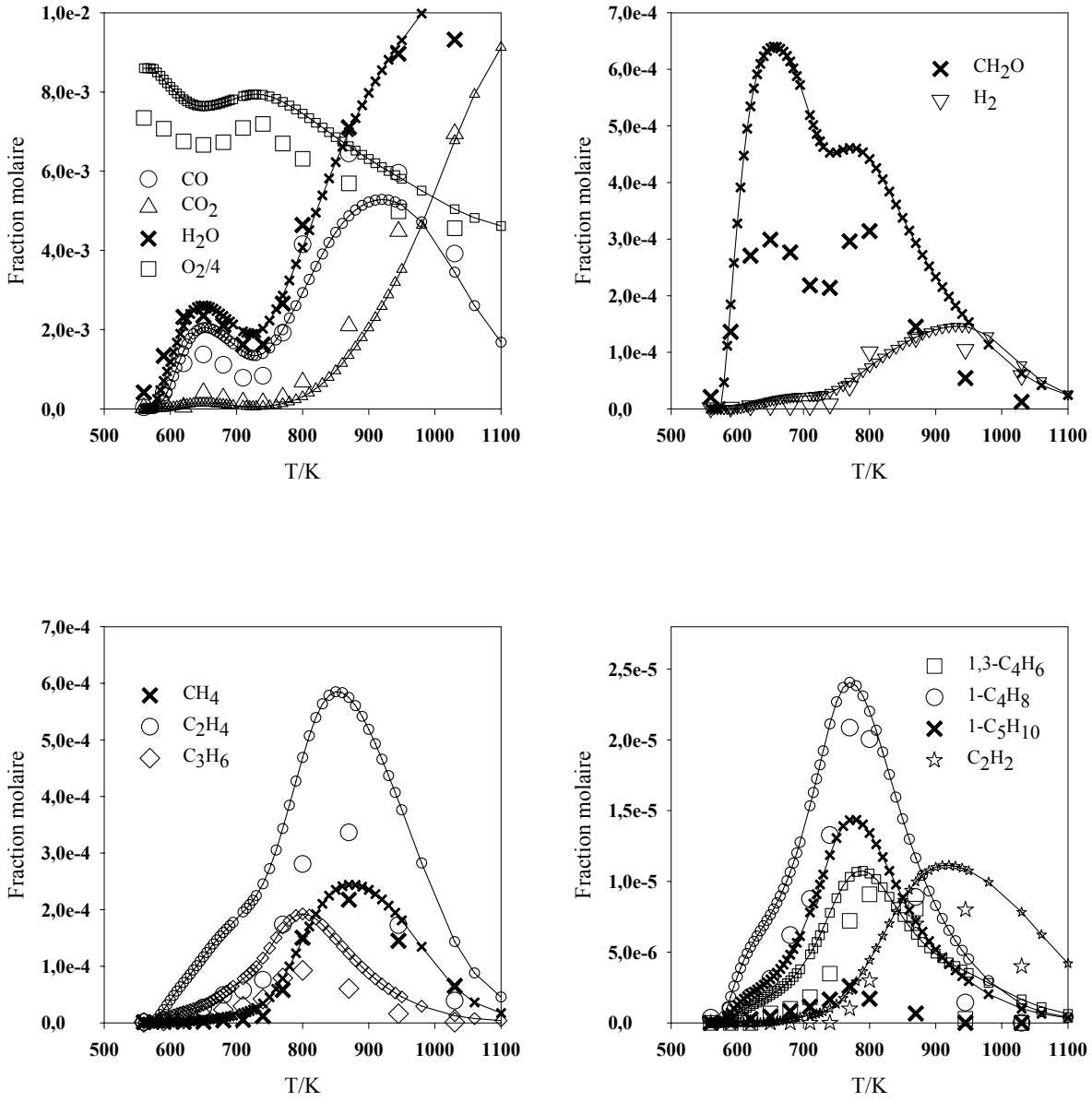


Figure V.45: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange massique SPK/Jet A-1 (50/50) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,41% ; X_{N2}=96,49% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0689% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,00753% $X_{butylbenzène}$=0,0115% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0316% ; X_{O2}=3,44% ; X_{N2}=96,44%

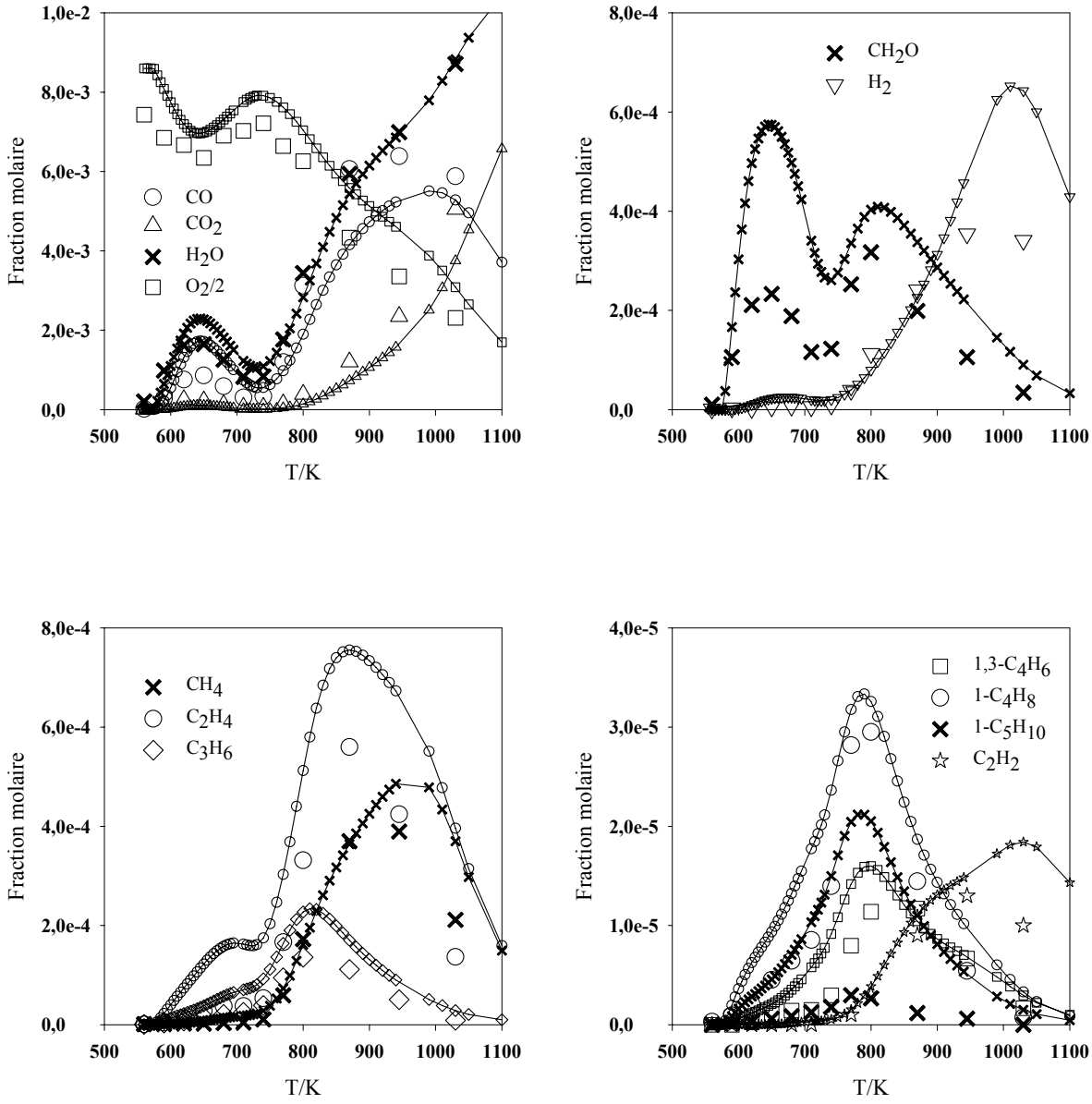


Figure V.46: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange massique SPK/Jet A-1 (50/50) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,70% ; X_{N2}=98,20% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0689% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,00753% $X_{butylbenzène}$=0,0115% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0316% ; X_{O2}=1,72% ; X_{N2}=98,16%

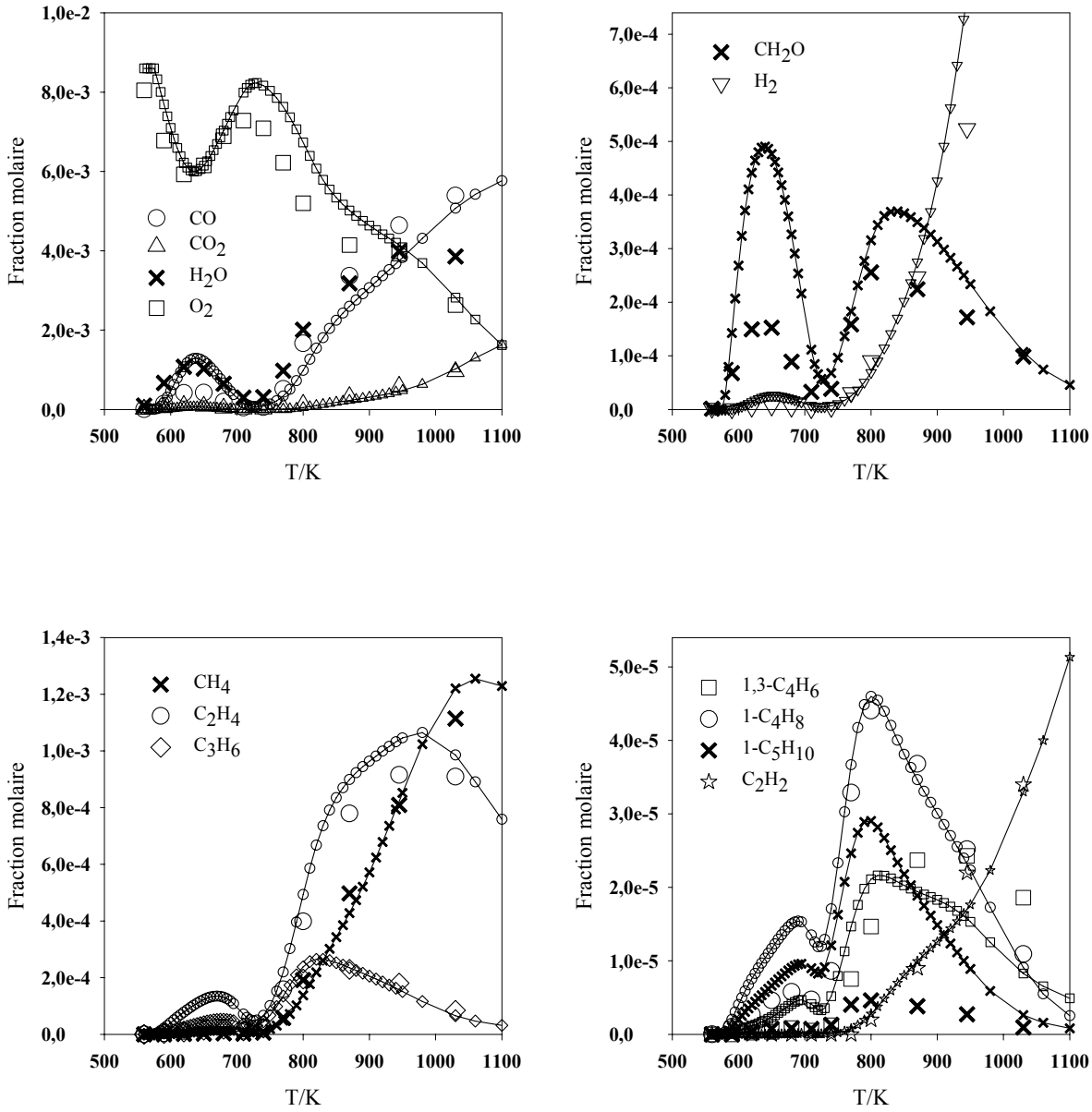


Figure V.47: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange massique SPK/Jet A-1 (50/50) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,85% ; X_{N2}=99,05% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0689% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,00753% $X_{butylbenzène}$=0,0115% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0316% ; X_{O2}=0,86% ; X_{N2}=99,02%

L'examen des figures ci-dessus conduit aux mêmes observations que lors de l'oxydation du kérosène de synthèse SPK (100%). Le mécanisme représente raisonnablement les profils de concentrations de CO, CO_2, O_2 et H_2. Il surestime les quantités de formaldéhyde pour les

trois richesses. L'éthylène et le propène sont aussi surestimés en milieu pauvre. Globalement, en milieu riche le modèle simule correctement les espèces formées. Néanmoins les quantités de méthane ne sont plus surestimées comme lors de l'oxydation du mélange SPK/Jet A-1 en milieu pauvre. En effet le modèle (mélange quaternaire) reproduit très bien le profil de concentration du méthane à Φ=0,5.

Ces résultats indiquent que l'iso-octane ne représente pas bien la fraction d'iso-paraffine présente initialement dans le carburant synthétique SPK (voir Tableau IV.19). L'iso-octane présente beaucoup de ramification. Ce qui explique la production importante de radicaux méthyles CH_3 par oxydation de l'iso-octane. D'où la surproduction de méthane et de formaldéhyde lors des simulations de l'oxydation du SPK (100%) et du mélange massique SPK/Jet A-1 (50%/50%). Par conséquent, l'utilisation d'une iso-paraffine moins ramifiée (présentant une ou deux ramifications) tel que le méthyldécane [8] devrait aider à améliorer le mécanisme cinétique.

5.4.4 Études expérimentales et modélisation des oxydations des kérosènes de synthèse GTL (Gas To Liquid) et CTL (Coal To Liquid)

Dans le cadre du projet européen ALFA-BIRD, nous avons mené des études cinétiques sur l'oxydation de certains carburéacteurs de synthèse : un GTL (Shell), un CTL (Sasol) et un mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v). Le GTL et le CTL sont des carburéacteurs alternatifs obtenus par la synthèse Fischer-Tropsch respectivement à partir du gaz naturel et du charbon.

5.4.4.1 Étude cinétique sur l'oxydation du GTL (Shell)

5.4.4.1.1 Conditions expérimentales

L'oxydation du GTL ($C_{10,45}H_{23,06}$; M = 148,44 g.mol^{-1} ; ρ = 0 ,737 g.cm^{-3}) a été réalisée en réacteur auto-agité JSR à des températures comprises entre 550 et 1150 K, pour trois richesses (Φ =0,5, 1 et 2), à haute pression (P=10 atm) et à un temps de passage constant (τ=1 s). Les conditions expérimentales de ces études sont indiquées ci-dessous.

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
550-1150	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}24.10^{-2}$	$9{,}666.10^{-1}$	0,5
550-1150	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$1{,}62.10^{-2}$	$9{,}828.10^{-1}$	1
550-1150	10	1	$1{,}0.10^{-3}$	$8{,}10.10^{-3}$	$9{,}909.10^{-1}$	2

Tableau V.15: Conditions expérimentales pour l'oxydation du GTL (Shell) en JSR

5.4.4.1.2 Résultats expérimentaux

Les espèces identifiées et quantifiées lors de l'oxydation du kérosène de synthèse issu du gaz naturel sont H_2, H_2O, O_2, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6, 1-C_5H_{10} et 1-C_6H_{12}. L'évolution des espèces majoritaires détectées en fonction de la température et pour trois richesses est présentée sur les figures ci-dessous. On observe bien les trois régimes d'oxydation : la flamme froide, le coefficient négatif de température et le domaine de haute température.

5.4.4.1.3 Confrontation expérience-modèle

Nous avons comparé les résultats expérimentaux aux résultats issus de la simulation. Le kérosène synthétique GTL a été représenté par un mélange modèle constitué en fraction molaire de n-décane (90,6%) et de l'iso-octane (9,4%). La confrontation expérience-modèle est présentée sur les figures suivantes.

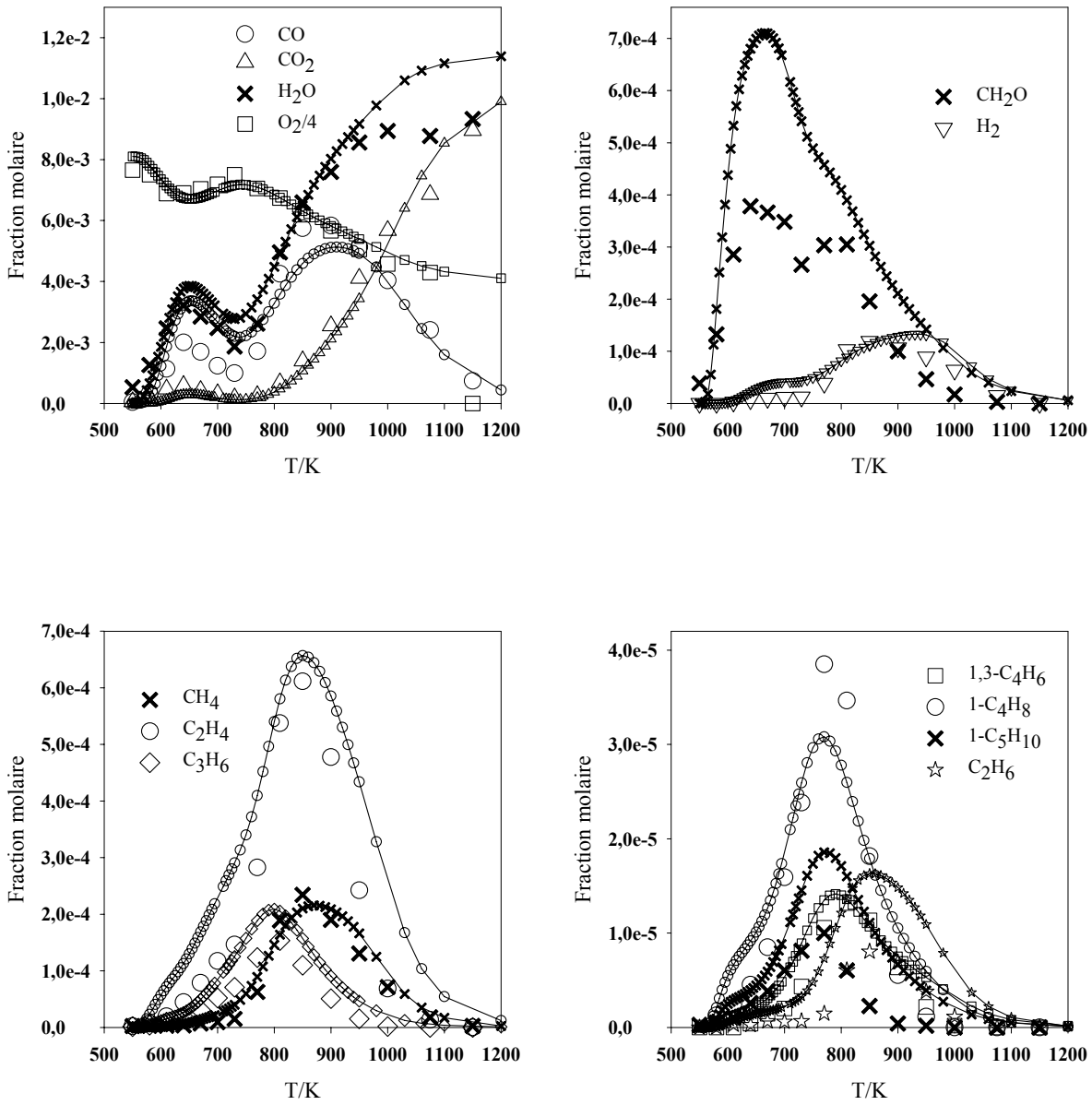


Figure V.48: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du GTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=3,24% ; X_{N2}=96,66% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0965% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0100% ; X_{O2}=3,24% ; X_{N2}=96,65%

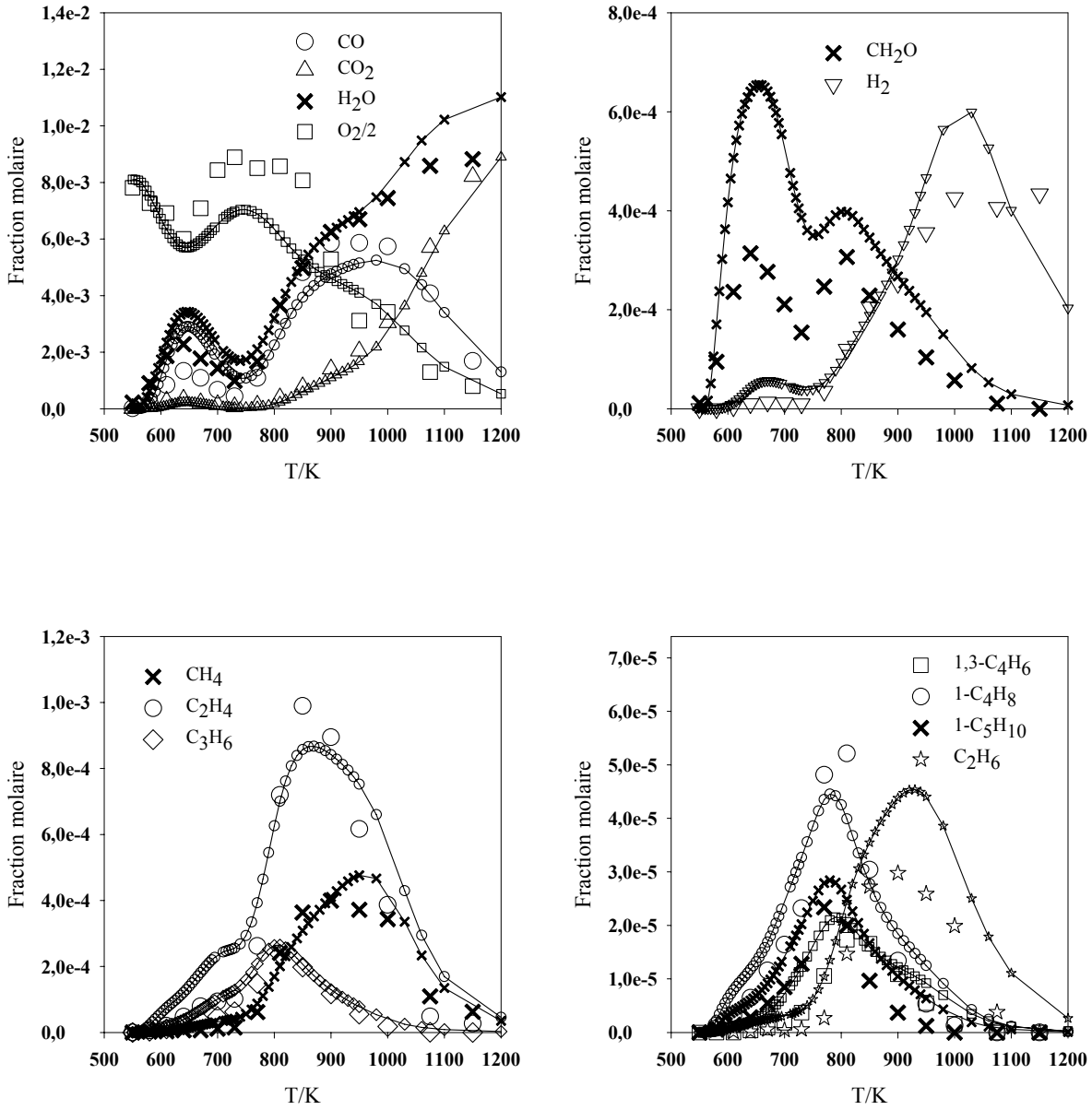


Figure V.49: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du GTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,62% ; X_{N2}=98,28%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0965% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0100% ; X_{O2}=1,62% ; X_{N2}=98,27%

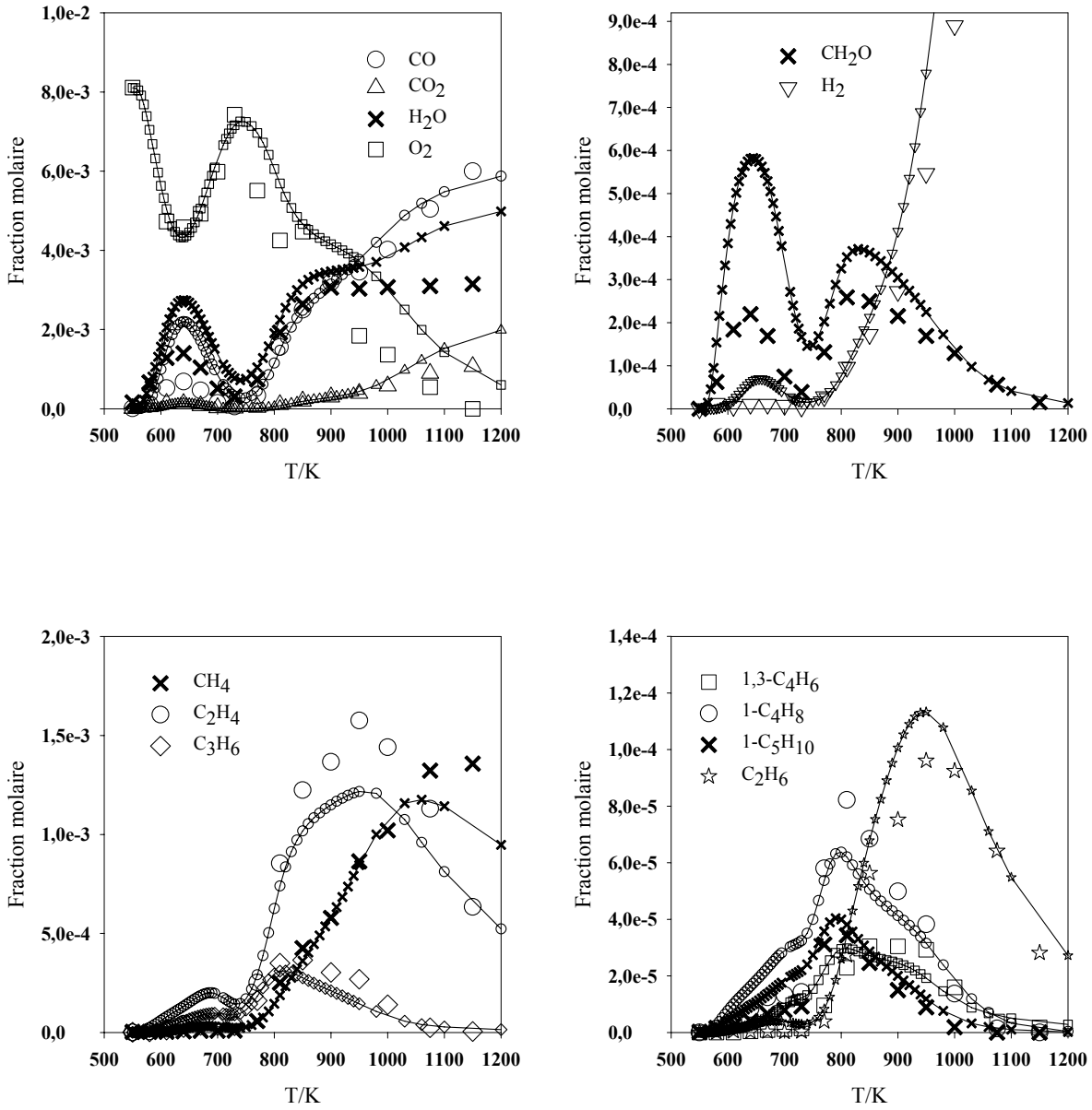


Figure V.50: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du GTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,81% ;
X_{N2}=99,09% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0965% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0100% ; X_{O2}=0,81% ; X_{N2}=99,08%

Les quantités de monoxyde de carbone et de dioxyde de carbone sont surévaluées à basse température pour les trois richesses. Le profil de l'eau est également surestimé par le modèle pour un mélange stoechiométrique et riche. Le formaldéhyde est quand à lui surestimé dans tout le domaine de température à Φ = 0,5, 1 et 2. Les fractions molaires des principales espèces oxygénées sont mal reproduites dans le domaine de la flamme froide. Globalement les espèces intermédiaires (CH_4, C_2H_4, C_2H_6, C_3H_6, 1-C_4H_8 et 1,3-C_4H_6) sont mal simulées à basse température mais raisonnablement reproduites pour des températures intermédiaires et hautes températures. La variation des proportions de n-décane et d'iso-octane dans le carburant-modèle permet d'améliorer les prédictions du modèle à basse ou à haute température, mais pas dans les deux conditions simultanément. Ce résultat indique une fois de plus la nécessité de rechercher d'autres molécules plus représentatives des carburants de synthèse (méthyldécane par exemple).

5.4.4.2 Étude cinétique sur l'oxydation du CTL (Sasol)

5.4.4.2.1 Conditions expérimentales

L'oxydation du carburéacteur de synthèse CTL ($C_{11,06}H_{21,6}$; M = 154,32 g.mol^{-1} ; ρ = 0 ,815 g.cm^{-3}) a été menée en réacteur auto-agité JSR entre 550 et 1150 K, à 3 richesses (Φ=0,5, 1 et 2), à haute pression (P=10 atm) et à un temps de passage constant (τ=1 s). Les conditions expérimentales sont résumées dans le Tableau V.16.

Température (K)	**Pression (atm)**	**Temps de passage (s)**	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	**richesse**
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$3,29.10^{-2}$	$9,661.10^{-1}$	0,5
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,65.10^{-2}$	$9,825.10^{-1}$	1
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$8,2.10^{-3}$	$9,908.10^{-1}$	2

Tableau V.16: Conditions expérimentales pour l'oxydation du CTL (Sasol) en JSR

5.4.4.2.2 Résultats expérimentaux

Nous avons suivi l'évolution de la concentration de quatorze espèces en fonction de la température (de 550 à 1150 K) en milieu pauvre (Φ=0,5), stoechiométrique (Φ=1) et riche (Φ=2). Les profils de concentration des espèces identifiées (H_2, H_2O, O_2, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_2H_2, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1,3-C_4H_6, 1-C_5H_{10}) ont été tracés.

5.4.4.2.3 Confrontation expérience-modèle

Le carburéacteur synthétique issu du charbon est constitué principalement de naphtènes d'iso-paraffines [8, 9]. Le carburéacteur synthétique CTL a été représenté par un mélange modèle n-décane/iso-octane/n-propylcyclohexane/n-butylbenzène (39,5% /13% /37,3% /10,2%). Les résultats issus de la simulation ont été confrontés avec les données expérimentales obtenues en réacteur auto-agité. Les figures suivantes présentent les résultats.

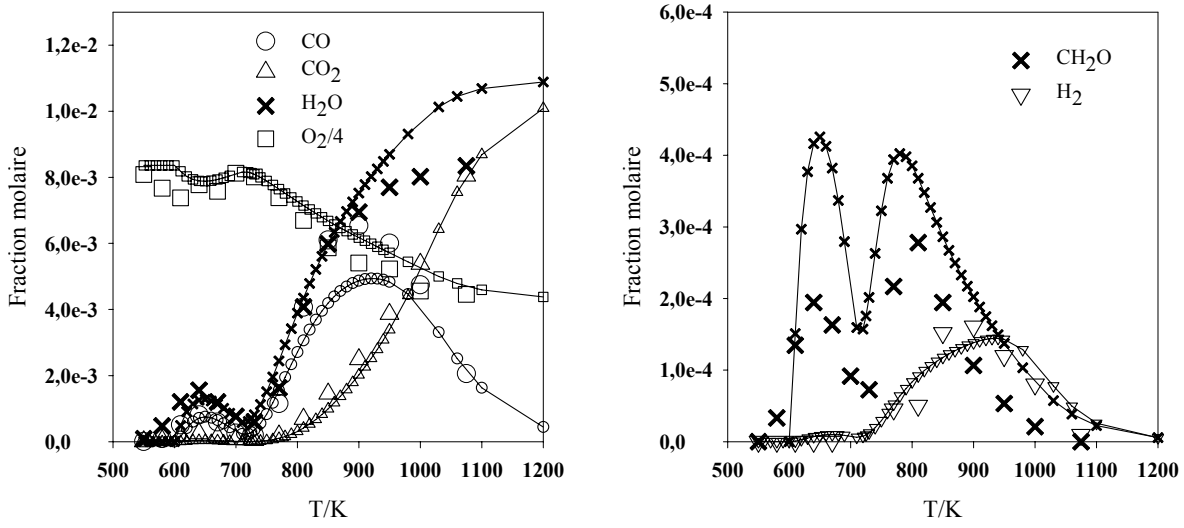


Figure V.54: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,29% ; X_{N2}=96,61%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=3,34% ; X_{N2}=96,47%

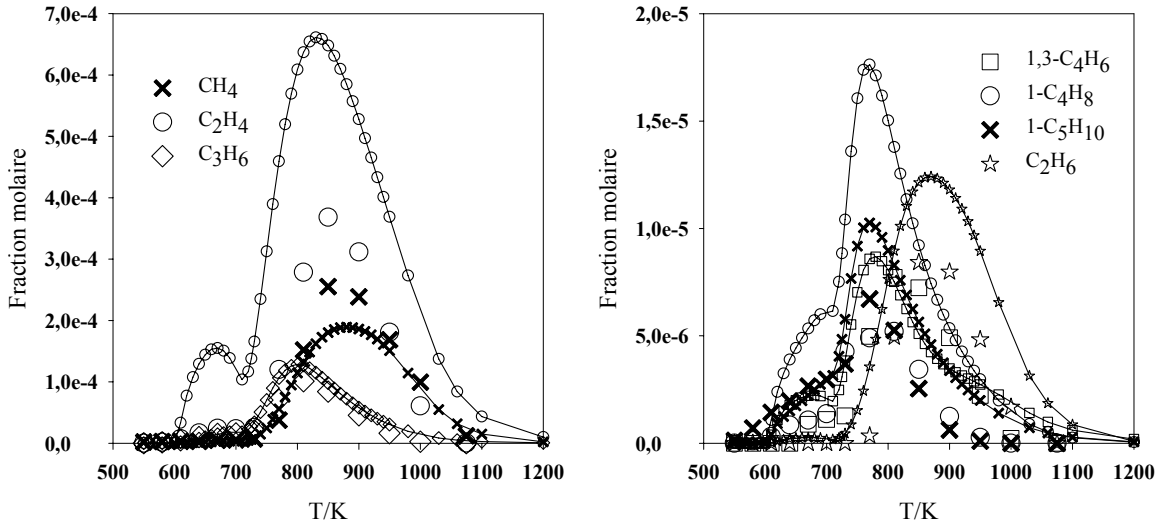


Figure V.54: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=3,29% ; X_{N2}=96,61%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=3,34% ; X_{N2}=96,47%

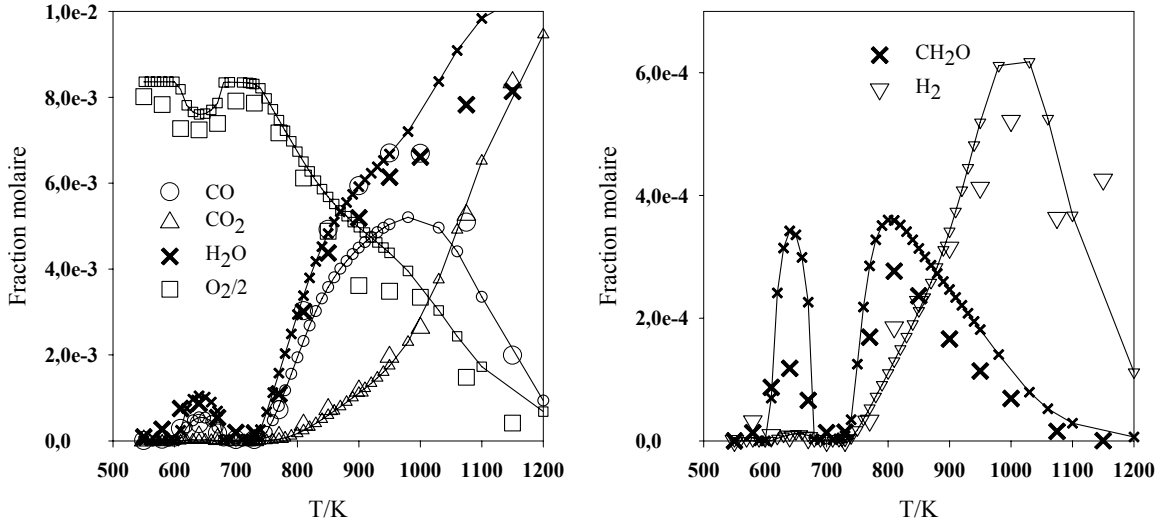


Figure V.55: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,65% ; X_{N2}=98,25%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=1,67% ; X_{N2}=98,21%

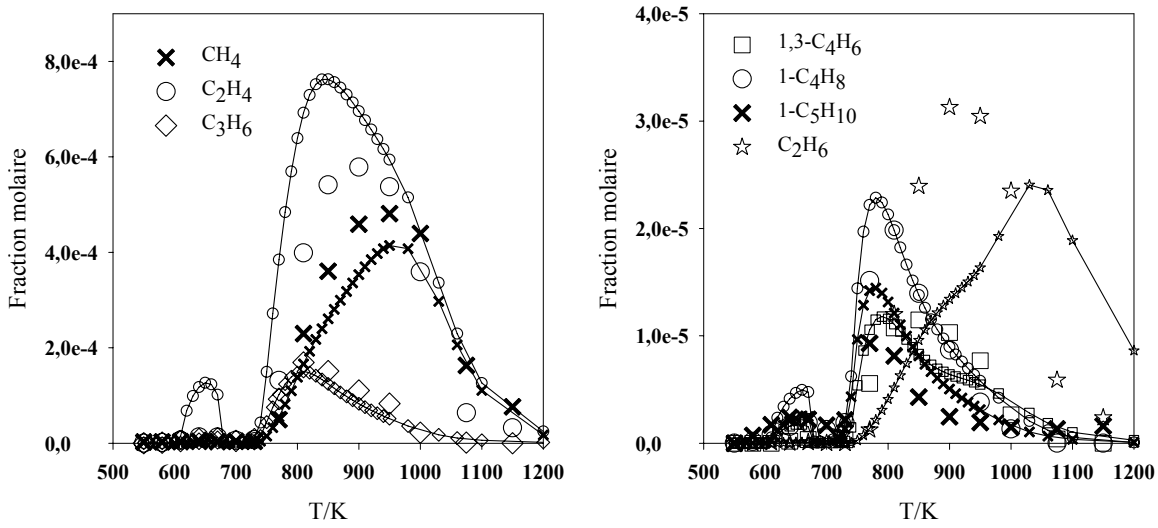


Figure V.55: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,65% ; X_{N2}=98,25%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ; $X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=1,67% ; X_{N2}=98,21%

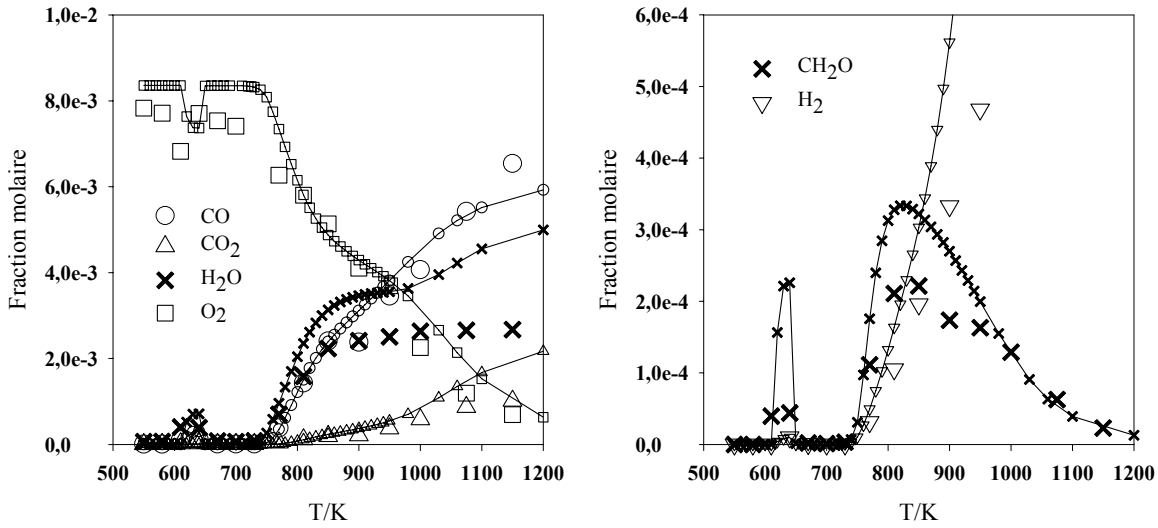


Figure V.56: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ;

X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,82% ;

X_{N2}=99,08%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ;

$X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=0,84% ; X_{N2}=99,05%

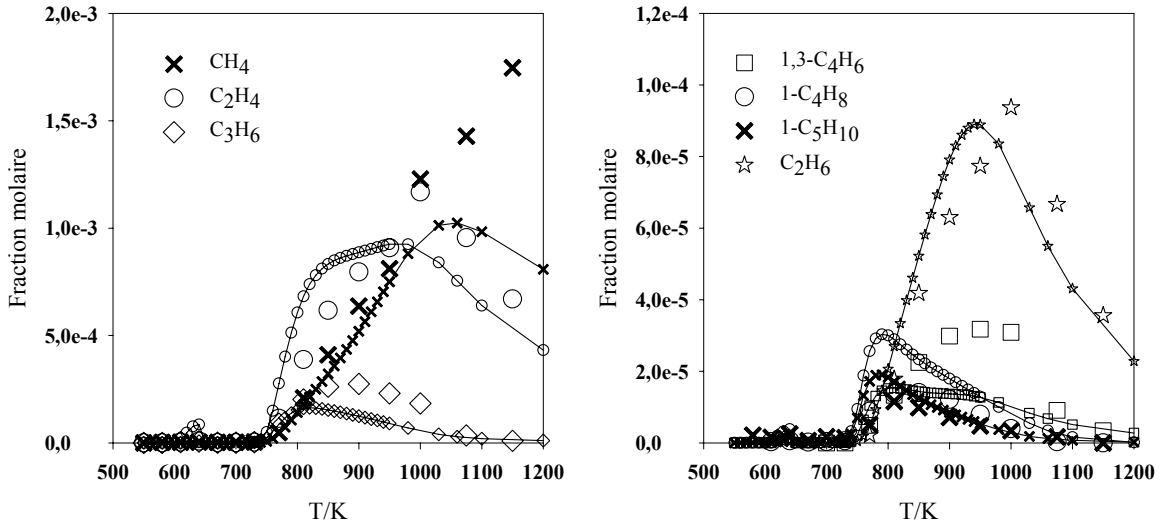


Figure V.56: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du CTL en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ;

X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=0,82% ;

X_{N2}=99,08%; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0466% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0154% ;

$X_{propylcyclohexane}$=0,0440% ; $X_{butylbenzène}$=0,0120% X_{O2}=0,84% ; X_{N2}=99,05%

Globalement la flamme froide est bien simulée. Les quantités de monoxyde de carbone de dioxyde de carbone et d'eau sont bien reproduites à basse et haute température. Cependant, le formaldéhyde est surestimé. Les espèces oxygènes sont mieux reproduites par le modèle en milieu pauvre et à la stoechiométrie (contrairement au GTL). Les quantités de méthane sont légèrement sous-estimées. Les profils d'éthylène et de but-1-ène sont mal reproduits par la modélisation. Par contre, le propène est simulé correctement en milieu pauvre et à la stoechiométrie.

5.4.5 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène Jet A-1 et des carburéacteurs de synthèse GTL (Shell), CTL (Sasol)

Nous avons effectué une comparaison entre les oxydations menées en réacteur auto-agité sur le kérosène conventionnel (Jet A-1) et les deux carburéacteurs synthétiques formés à partir de la synthèse Fischer-Tropsch (GTL et CTL) en milieu stoechiométrique.

Le tableau ci-dessous (Tableau V.16) présente un récapitulatif des conditions opératoires utilisées en réacteur auto-agité lors des trois oxydations (Jet A-1, GTL et CTL).

Carburant	**Formule Brute**	**M (g/mol)**	**Z**	**P (atm)**	**τ (s)**	**T (K)**	**richesse**	**X_{HC}**
Jet A-1	$C_{11}H_{22}$	154	16,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
GTL (Shell)	$C_{10,45}H_{23,06}$	148,44	16,215	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
CTL (Sasol)	$C_{11,06}H_{21,6}$	154,32	16,46	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%

Tableau V.17: Récapitulatif des conditions expérimentales en JSR

Les fractions molaires des principaux polluants et imbrûlés émis lors des oxydations du kérosène conventionnel (Jet A-1) et des deux carburéacteurs de synthèse (GTL et CTL) en milieu stoechiométrique sont présentées sur les figures suivantes.

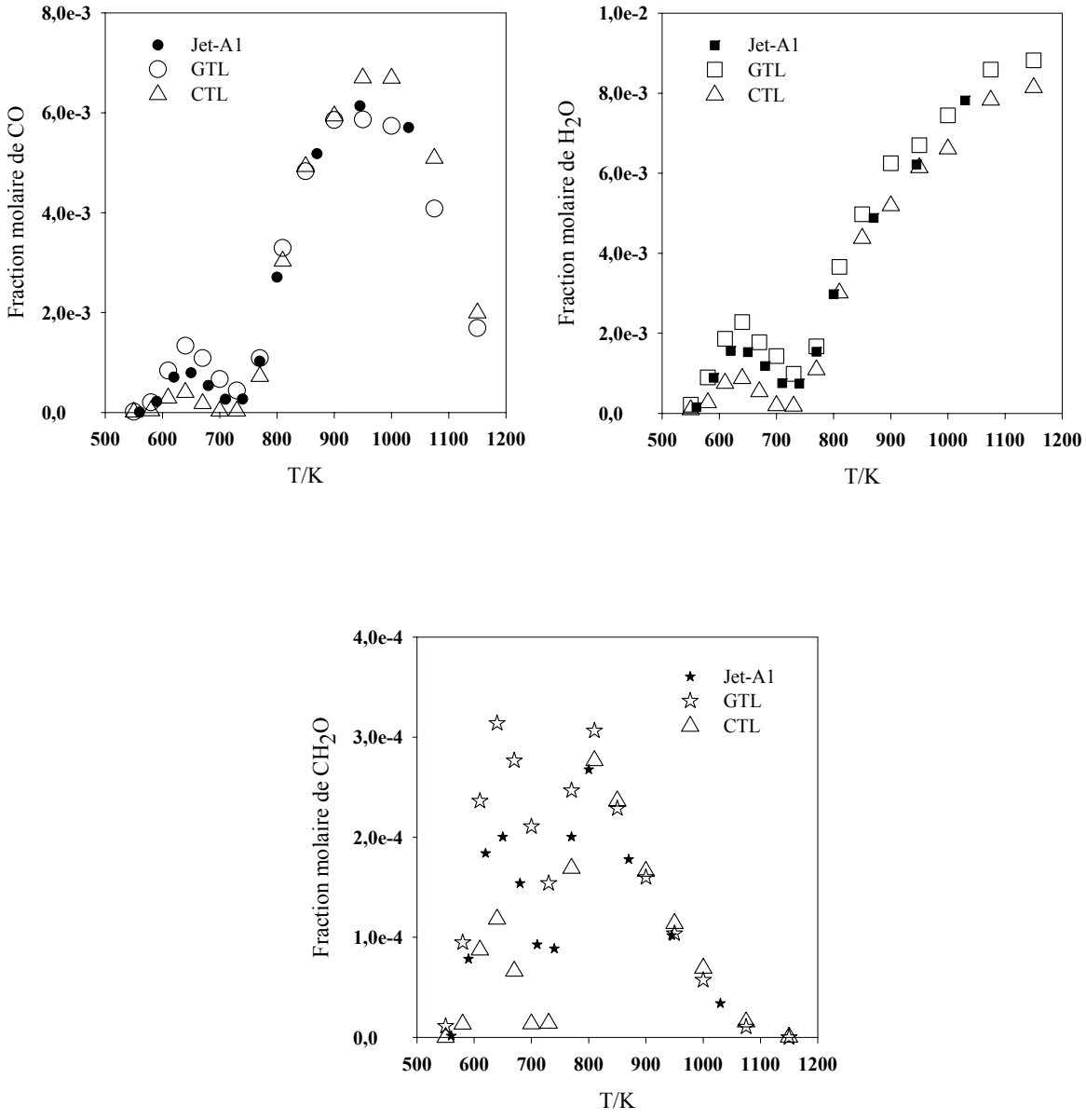


Figure V.57: Profils expérimentaux des espèces issues de l'oxydation du kérosène Jet A-1 (symboles pleins), du kérosène de synthèse GTL (symboles vides) et du CTL (symboles en couleur) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

Le carburéacteur de synthèse issu du gaz naturel (GTL) est plus réactif que le kérosène conventionnel Jet A-1 à basse température. Ce dernier a une réactivité plus importante que le

CTL. Les quantités d'espèces oxygénées (CO, H_2O, CH_2O) produites lors de l'oxydation du CTL à la stoechiométrie sont moins élevées que celles formées lors de l'oxydation du GTL et du Jet A-1. Cependant, lorsqu'on augmente la température (T>800 K) on remarque une oxydation similaire des trois carburéacteurs.

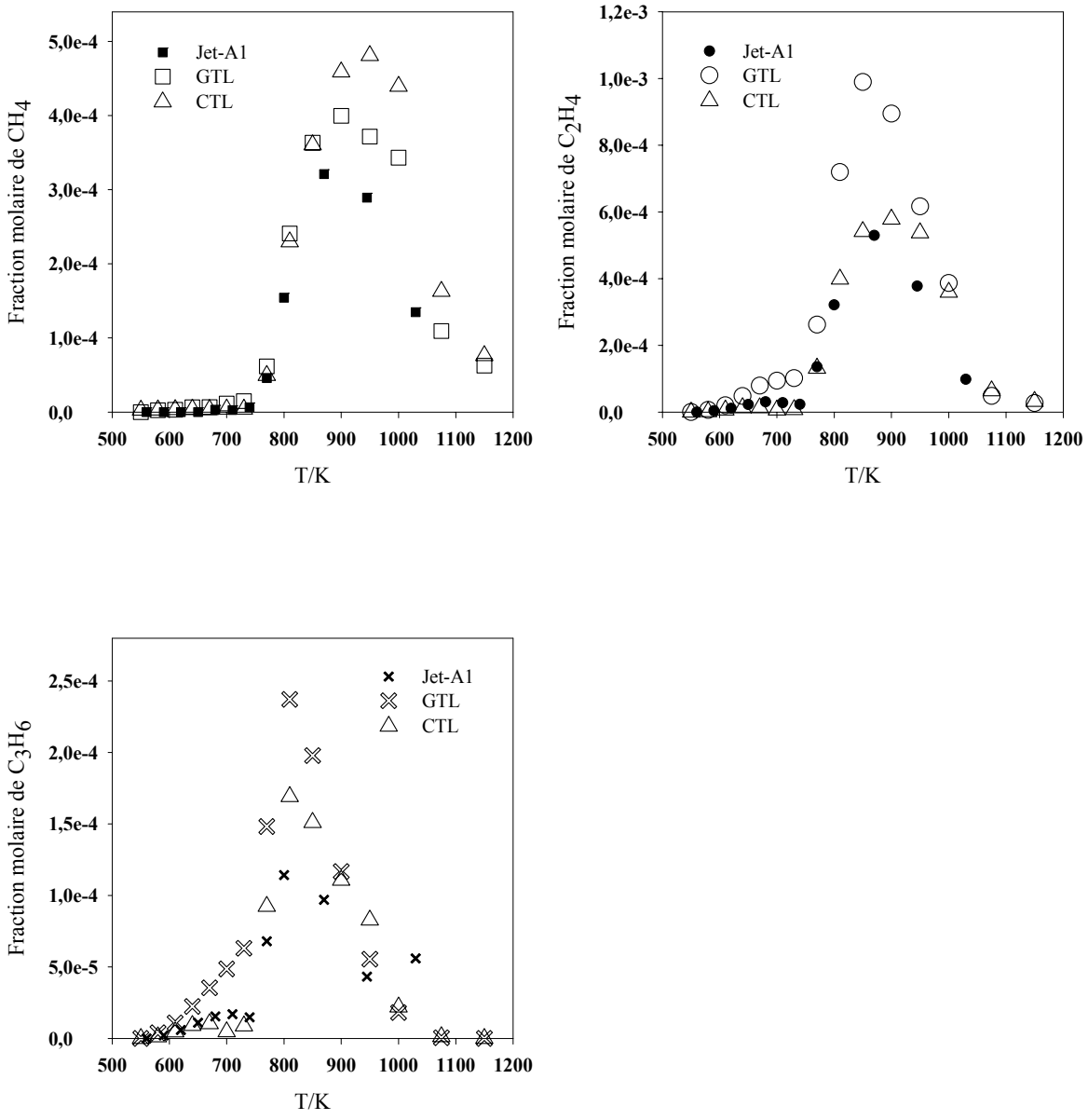


Figure V.57: Profils expérimentaux des espèces issues de l'oxydation du kérosène Jet A-1 (symboles pleins), du kérosène de synthèse GTL (symboles vides) et du CTL (symboles en couleur) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

L'oxydation des carburéacteurs de synthèses GTL et CTL forme plus de méthane, d'éthylène et de propène que le kérosène commerciale Jet A-1.

5.4.6 Étude expérimentale et modélisation de l'oxydation du mélange GTL /hexan-1-ol (80/20, v/v)

5.4.6.1 Conditions expérimentales

L'oxydation du mélange entre un kérosène de synthèse GTL (Shell) et un alcool lourd (hexan-1-ol) (80/20, volumes) a été étudiée expérimentalement en réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR) sur un large domaine de températures ($550 \leq T\ (K) \leq 1150$), à haute pression (10 atm) et à des richesses comprises entre 0,5 et 2. Tout au long de nos expériences le temps de passage a été maintenu constant (τ=1 s).
Les caractéristiques physico-chimiques de ce carburant sont les suivantes:

- formule chimique $C_{9,17}H_{20,45}O_{0,29}$
- masse molaire M = 135,13 $g.mol^{-1}$
- masse volumique ρ = 0,753 $g.cm^{-3}$
- coefficient stœchiométrique Z = 14,14

Le tableau ci-dessous présente les conditions expérimentales utilisées en réacteur auto-agité pour étudier l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v).

Température (K)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{HC}	$X_{O2\ initiale}$	$X_{N2\ initiale}$	richesse
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$2,83.10^{-2}$	$9,707.10^{-1}$	0,5
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$1,86.10^{-2}$	$9,805.10^{-1}$	1
550-1150	10	1	$1,0.10^{-3}$	$7,10.10^{-3}$	$9,919.10^{-1}$	2

Tableau V.18: Conditions expérimentales pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en JSR.

5.4.6.2 Résultats expérimentaux

Les profils de concentrations des principales espèces issues de l'oxydation du carburant ont été tracés en fonction de la température du milieu à Φ = 0,5, 1 et 2. L'évolution de la fraction molaire d'hexan-1-ol en fonction de la température a aussi été étudiée.

5.4.6.3 Confrontation expérience-modèle

Pour modéliser l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, en volumes), nous avons utilisé un mélange de trois composés modèles : le n-décane (65,7%, mole) l'iso-octane (6,8%, mole) et l'hexan-1ol (27,5%, mole).
Les résultats conduisent aux mêmes observations que lors de l'oxydation du carburéacteur GTL. Par ailleurs, le profil de concentration de l'hexan-1-ol est simulé correctement par le modèle.

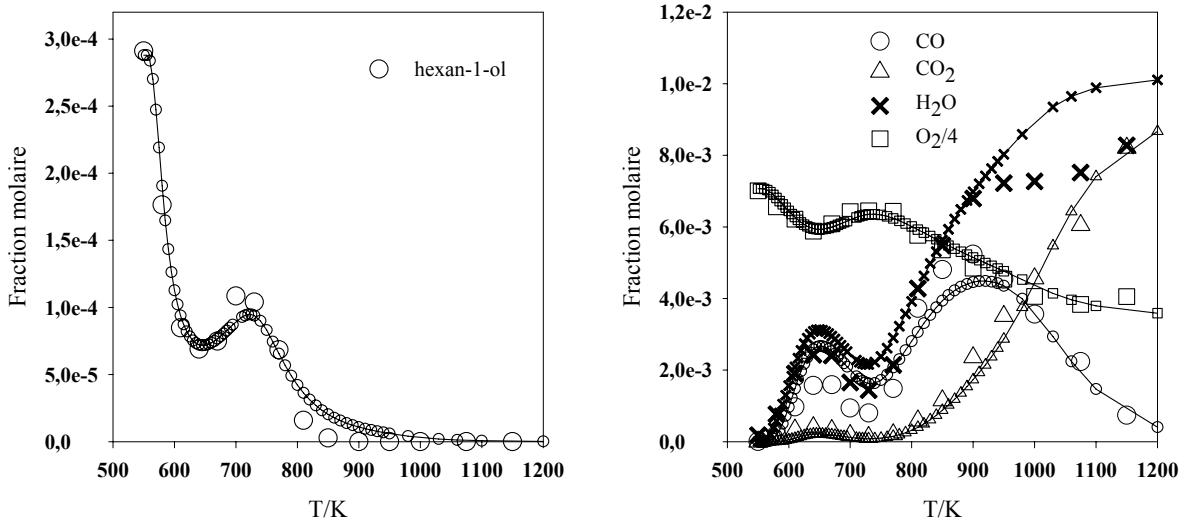


Figure V.58: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=2,83% ; X_{N2}=97,07% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=2,83%% ; X_{N2}=97,07%

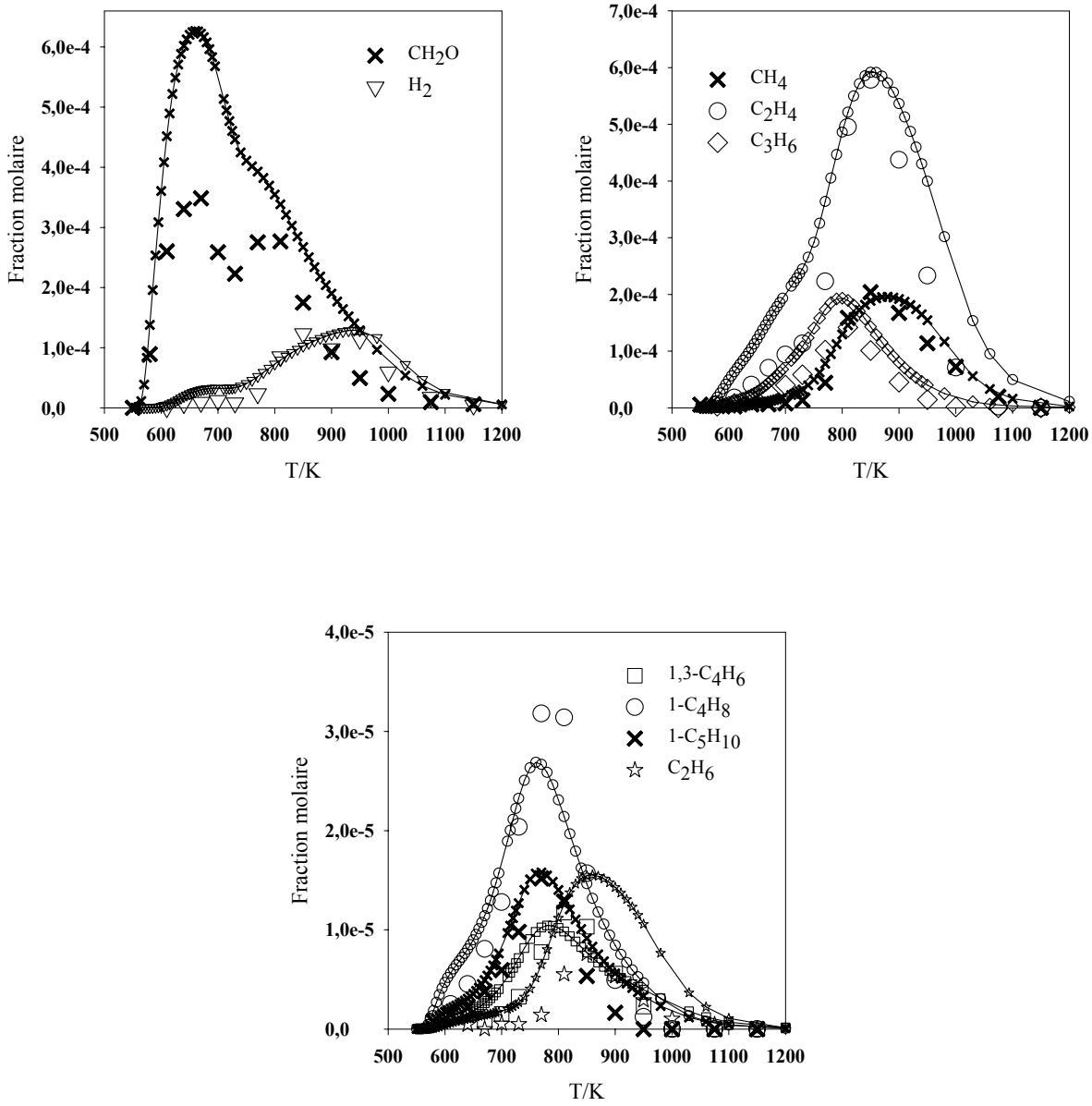


Figure V.58: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ=1 s ; Φ=0,5 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=2,83% ; X_{N2}=97,07% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=2,83%% ; X_{N2}=97,07%

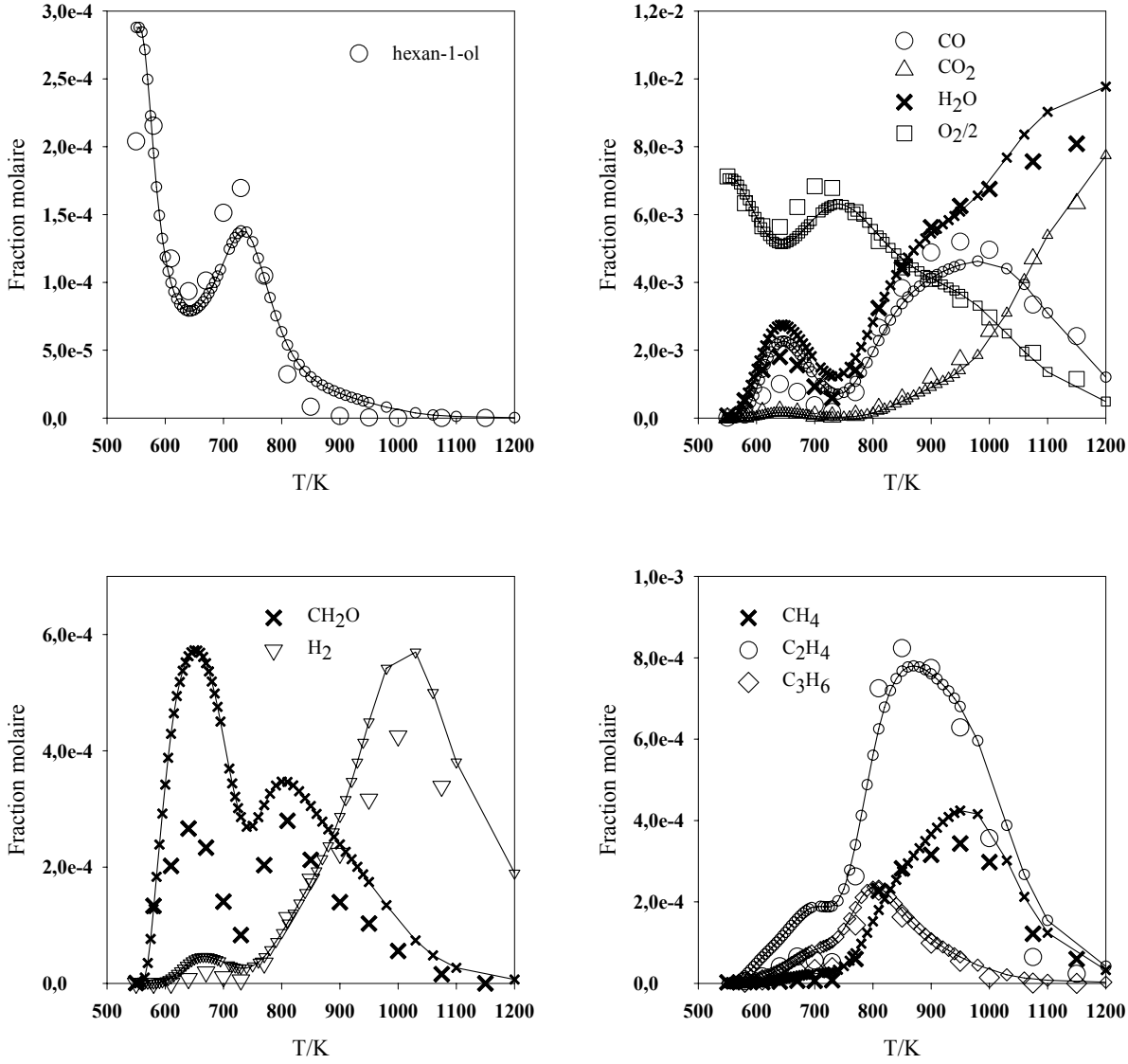


Figure V.59: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto-agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,41% ; X_{N2}=98,49% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=1,41% ; X_{N2}=98,48%

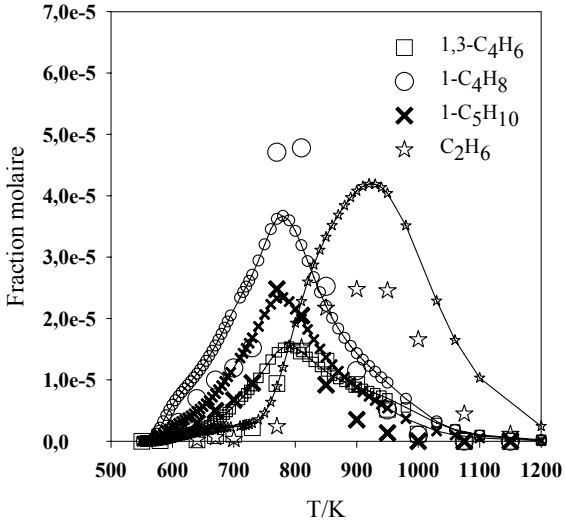


Figure V.59: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto- agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=1 ; X_{HC}=0,1% ; X_{O2}=1,41% ; X_{N2}=98,49% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=1,41% ; X_{N2}=98,48%

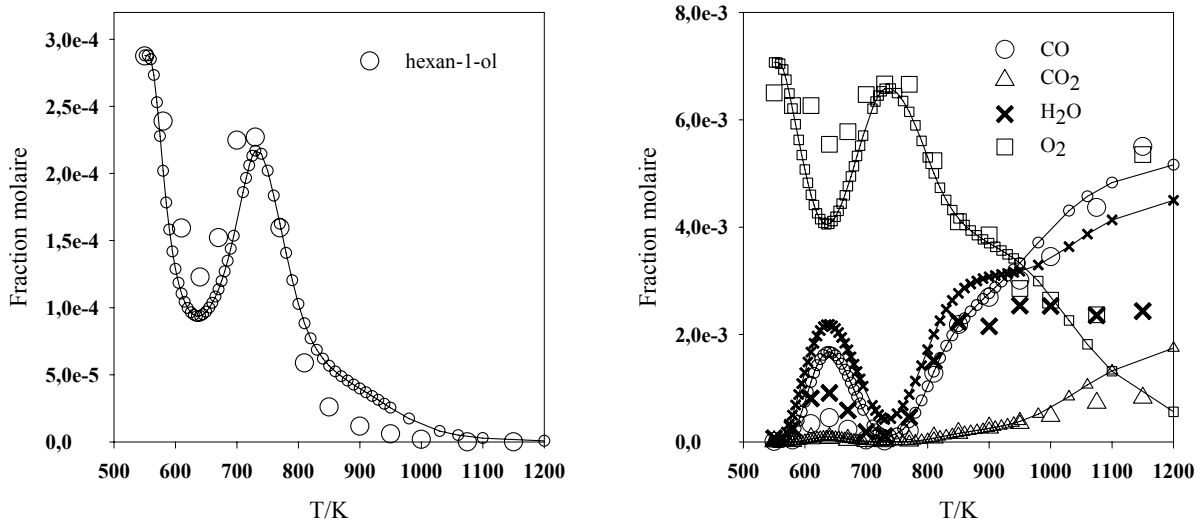


Figure V.60: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto- agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=0,71% ; X_{N2}=99,19% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=0,71% ; X_{N2}=99,19%

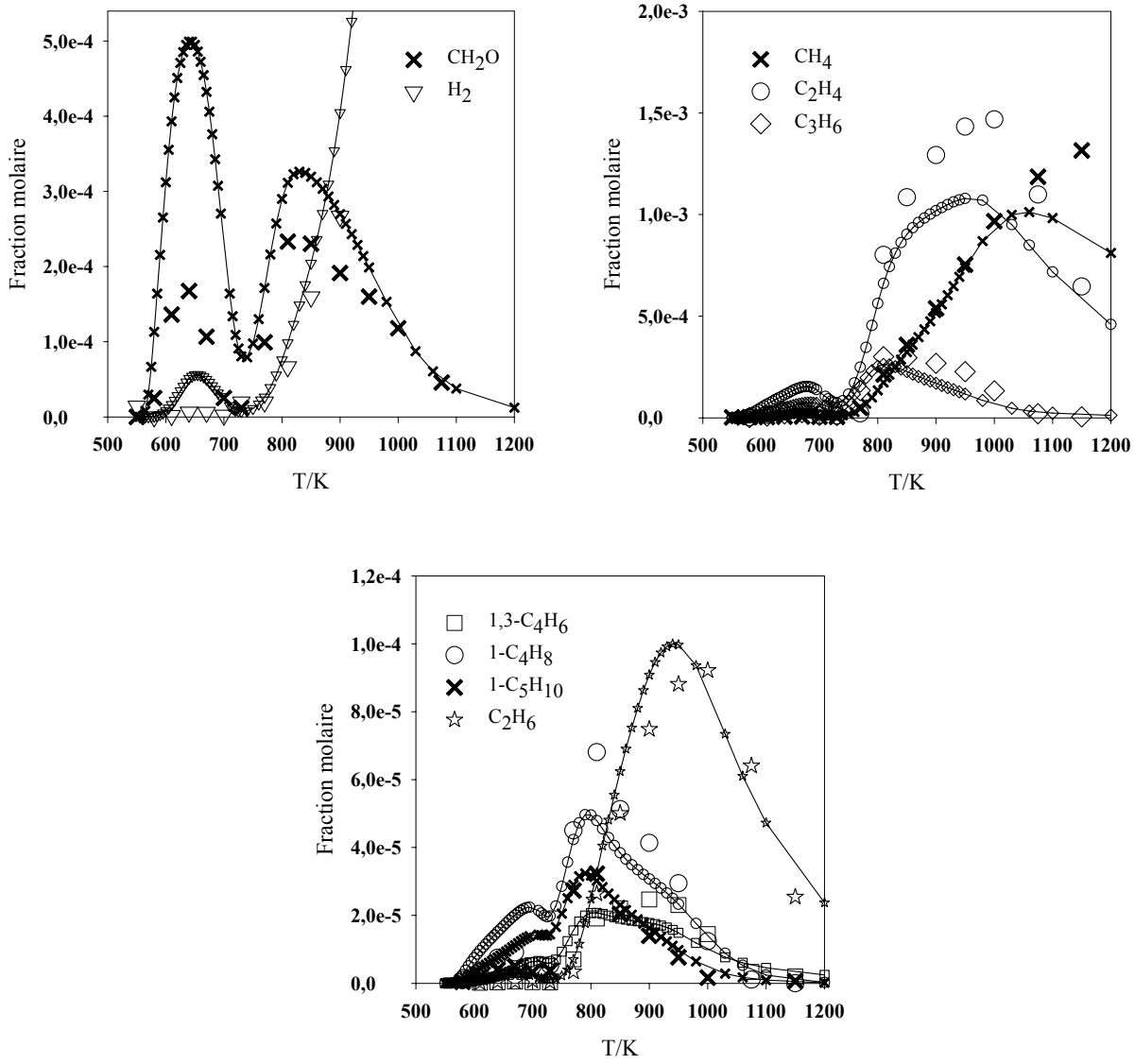


Figure V.60: Confrontation expérience (grands symboles)-modèle (traits pleins et petits symboles) pour l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) en réacteur auto- agité: P=10 atm ; τ =1 s ; Φ=2 ; X_{HC}=0,1%; X_{O2}=0,71% ; X_{N2}=99,19% ; carburant-modèle : $X_{décane}$=0,0688% ; $X_{iso\text{-}octane}$=0,0071% ; $X_{hexan\text{-}1\text{-}ol}$=0,0288% ; X_{O2}=0,71% ; X_{N2}=99,19%

5.4.7 Étude comparative entre l'oxydation du kérosène de synthèse GTL (Shell) et d'un mélange GTL(Shell)/hexan-1-ol (80/20, v/v)

Nous avons par la suite comparé l'oxydation du kérosène de synthèse issu du gaz naturel GTL (Shell) et l'oxydation du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, en volume) en réacteur auto-agité, dans les mêmes conditions expérimentales (550≤ T (K) ≤1150, P=10 atm, Φ=1, $X_{carburant}$=1000 ppm et τ=1 s).

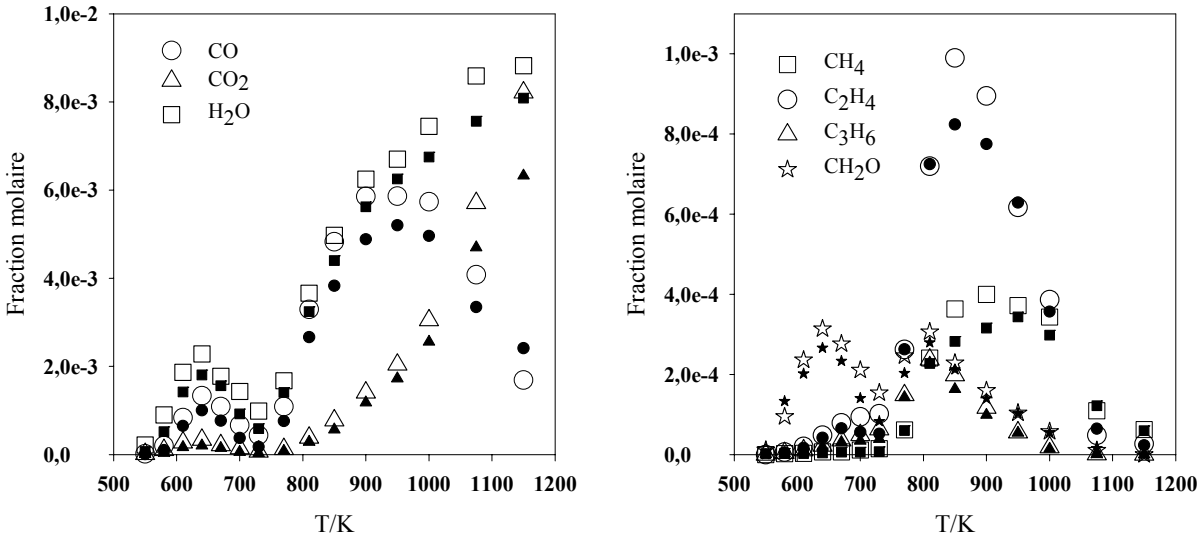


Figure V.61: Profils expérimentaux des espèces issues des oxydations du mélange GTL/hexan-1-ol (symboles pleins) et du kérosène de synthèse GTL (symboles vides) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

Les figures ci-dessus montrent que le carburéacteur de synthèse pur (GTL) est plus réactif que le mélange GTL/hexan-1-ol, 80/20 v/v. L'ajout de 20% d'hexan-1-ol entraîne une diminution de la concentration des espèces produites lors de l'oxydation du GTL. Ceci résulte essentiellement de la réduction de la quantité de carbone introduite dans le système. En effet la composition du GTL est $C_{10,45}H_{23,06}$ alors que le mélange contenant de l'hexan-1-ol est $C_{9,17}H_{20,45}O_{0,29}$.

Nous avons donc comparer les résultats obtenus en réacteur auto-agité pour l'oxydation du GTL et du mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) avec la même quantité de carbone initiale. Les résultats sont présentés ci-dessous.

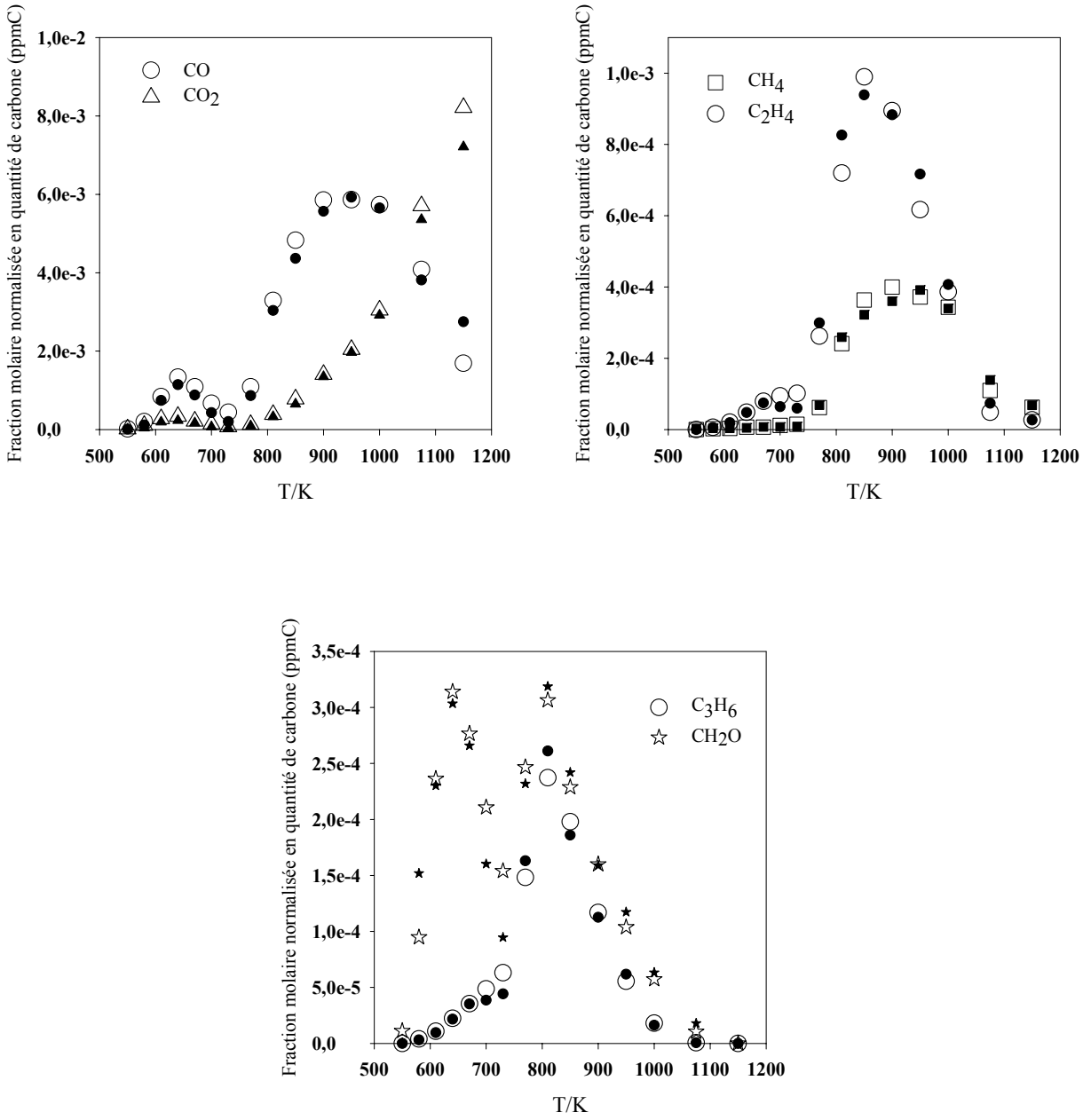


Figure V.61: Profils expérimentaux des espèces issues des oxydations du mélange GTL/hexan-1-ol (symboles pleins) et du kérosène de synthèse GTL (symboles vides) en JSR (P=10 atm, Φ=1, τ=1 s, X_{HC}=0,1%)

On observe un comportement similaire lors des deux expériences d'oxydation. En effet l'ajout de 20% d'hexan-1-ol n'a pas eu d'effet notable sur la réactivité et la formation de polluants. Ce constat nous amène à dire que l'introduction de carburant issu de la biomasse dans le kérosène de synthèse est possible sans changer la réactivité du carburant initial.

5.5 Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre l'oxydation de trois hydrocarbures lourds, de kérosène conventionnel, kérosènes reformulés et de kérosènes de synthèse en réacteur auto-agité par jets gazeux à des températures comprises entre 550 et 1150 K et à haute pression (10 atm).

Ces expériences nous ont permis d'identifier des polluants majoritaires tels que le monoxyde de carbone qui est un composé toxique, le dioxyde de carbone et le méthane qui sont des gaz à effet de serre. Nous avons également détecté des polluants de l'air (TAP) dont l'acétaldéhyde, le formaldéhyde, le buta-1,3-diène et le benzène.

Nous avons observé un comportement similaire lors de l'oxydation des hydrocarbures lourds (n-décane, n-undécane, n-dodécane et n-tétradécane) et du kérosène conventionnel. Par ailleurs, nous avons également remarqué que l'ajout de carburant issu de la biomasse (alcool et ester) dans le kérosène conventionnel Jet A-1 n'a pas eu d'effet important sur la réactivité et la formation de polluants.

Enfin, des mécanismes cinétiques ont été développés puis validés sur la base des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité.

Références bibliographiques

[1] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[2] M. Cathonnet, D. Voisin, A. Etsordi, C. Sferdean, M. Reuillon, J.C. Boettner and P. Dagaut

Kerosene combustion modeling using detailed and reduced chemical kinetic mechanisms, The RTO AVT Symposium on "Gas Turbine Engine Combustion, Emissions and Alternative Fuels" Paper No 14, 1998, Lisbon

[3] P. Dagaut, A. El Bakali, A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate mode fuels, Fuel, 2006, vol. 85, pp. 944-956

[4] S. S. Vasu, D. F. Davidson, Z. Hong, V. Vasudevan and R. K. Hanson

n-Dodecane oxidation at high-pressures: Measurements of ignition delay times and OH concentration time-histories, Proceedings on the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 173-180

[5] D. F. Davidson, Z. Hong, G. L. Pilla, A. Farooq, R. D. Cook and R. K. Hanson

Multi-species time-history measurements during n-dodecane oxidation behind reflected shock waves, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 151–157

[6] C. K. Westbrook

A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane, Combustion and Flame, vol. 156, pp. 181-199

[7] P. Dagaut

On the kinetic of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel, Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, vol. 4, pp. 2079-2094

[8] M. Colket, T. Edwards, S. Williams, N. P. Cernansky, D. L. Miller, F. Egolfopoulos, P. Lindstedt et al.

Development of an experimental database and kinetic models for surrogate jet fuels, 45th AIAA Aerospaces Sciences Meeting and Exhibit, 2007, Paper 2007-770, Nevada

[9] L. M. Balster, E. Corporan, M. J. DeWitt, J. T. Edwards, J. S. Ervin, J. L. Graham, S-Y. Lee *et al*

Development of an advanced, thermally stable, coal-based jet fuel, Fuel Processing Technology, 2008, vol. 89, pp. 364-378

CHAPITRE 6 :

CONCLUSION GENERALE

6 Conclusion générale

Dans ce travail de thèse, nous avons étudié la cinétique chimique d'oxydation de trois n-alcanes lourds (le n-undécane, le n-dodécane et le n-tétradécane) et de kérosènes reformulés (biocarburants et carburants de synthèse) pour lesquels peu ou pas d'études antérieures étaient disponibles dans la littérature. L'oxydation d'un kérosène conventionnel (Jet A-1) a aussi été menée, servant de référence. Ces travaux ont été menés dans une large gamme de conditions opératoires. Elles ont permis d'observer les principaux mécanismes d'oxydation des carburants : flamme froide, coefficient négatif de température et oxydation de haute température. Nous avons également étudié l'influence de l'ajout d'additifs sur la réactivité du carburant et sur la formation de polluants et d'imbrûlés.

Nous avons dans un premier temps obtenu des données expérimentales sur l'oxydation d'un kérosène commerciale Jet A-1, de trois composés purs à longue chaîne carbonée (le n-undécane, le n-dodécane et le n-tétradécane), de carburants reformulés (les mélanges kérosène/hexan-1-ol (90/10, m/m), kérosène/RME (90/10, m/m) et kérosène/SPK (50/50, m/m), de carburants de synthèse purs (SPK (IFP), GTL (Shell), CTL (Sasol)). La cinétique d'oxydation d'un mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) a également été étudiée. Ces données expérimentales ont été obtenues grâce à des études menées en réacteur auto-agité par jets gazeux à pression élevée (10 atm) et à temps de passage constant (τ= 1 s). Les tableaux ci-dessous (Tableau VI.1, VI.2 et VI.3) résument les différentes expériences menées en JSR.

Carburant	Formule brute	M (g/mol)	Z	P (atm)	τ (s)	T (K)	richesse	X_{HC}
Undécane	$C_{11}H_{24}$	156,31	17	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
Dodécane	$C_{12}H_{26}$	170,34	18,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
Tétradécane	$C_{14}H_{30}$	198,39	21,5	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%

Tableau VI.1: Récapitulatif des études menées en réacteur auto-agité pour l'oxydation des hydrocarbures lourds

Carburant	Formule Brute	M (g/mol)	Z	P (bar)	τ (s)	T (K)	richesse	X_{HC}
Jet A-1	$C_{11}H_{22}$	154	16,5	10	1	560-1030	0,5 ;1,0 et 2,0	0,1%
Jet A-1/hexan-1-ol	$C_{10,28}H_{20,85}O_{0,14}$	144,37	15,42	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
Jet A-1/RME	$C_{11,40}H_{22,63}O_{0,11}$	161,26	17	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%

Tableau VI.2: Récapitulatif des études menées en réacteur auto-agité pour l'oxydation d'un kérosène conventionnel Jet A-1 et de deux kérosènes reformulés (bio kérosène)

Carburant	Formule Brute	M (g/mol)	Z	P (bar)	τ (s)	T (K)	richesse	X_{HC}
SPK (IFP)	$C_{11,5}H_{24,41}$	162,41	17,60	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
Jet A-1/SPK (IFP)	$C_{11,24}H_{23,17}$	158,05	17,03	10	1	560-1030	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
GTL (Shell)	$C_{10,45}H_{23,06}$	148,44	16,215	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
CTL (Sasol)	$C_{11,06}H_{21,6}$	154,32	16,46	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%
GTL(Shell)/hexan-1-ol	$C_{9,17}H_{20,45}O_{0,29}$	135,13	14,14	10	1	550-1150	0,5 ; 1,0 et 2,0	0,1%

Tableau VI.3: Récapitulatif des études menées en réacteur auto-agité pour l'oxydation de kérosènes de synthèse

Les méthodes d'analyse utilisées, i.e. chromatographie en phase gazeuse (CPG) couplé à des détecteurs (TCD, FID et MS) et la spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF), nous ont permis d'identifier et de quantifier les produits de combustion formés lors de nos expériences. Nous avons par ailleurs suivi l'évolution de la concentration

des réactifs, des produits finals (CO_2 et H_2O) et d'intermédiaires stables en fonction de la température, à trois richesses (Φ=0,5, 1 et 2).

Lors de ces expériences, nous avons détecté des polluants de l'air ainsi que des composés ayant un impact sur l'augmentation de l'effet de serre. L'acétaldéhyde, le formaldéhyde, le buta-1,3-diène et le benzène sont des composés classés comme polluants toxiques de l'air (TAP). Le monoxyde de carbone qui est l'espèce intermédiaire majoritaire identifiée lors de nos expériences est un composé toxique ; le méthane et le dioxyde de carbone sont des gaz à effet de serre.

Nous avons observé un comportement similaire (le régime de basse température, le coefficient négatif de température et le régime de haute température) lors de l'oxydation en réacteur auto-agité d'hydrocarbures à longue chaîne carbonée (n-décane, n-undécane, n-dodécane et n-tétradécane) et du kérosène conventionnel (Jet A-1).

Les études menées sur l'oxydation des kérosènes reformulés, dont le mélange Jet A-1/hexan-1-ol (90/10, m/m) et le mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m), ont montré un comportement similaire à celui du kérosène conventionnel Jet A-1 s'oxydant dans les mêmes conditions. En effet l'ajout de 10% d'alcool et d'esters (huile de colza) au Jet A-1 n'a pas eu d'effet notable sur la réactivité et la formation de polluants principaux.

Dans le cadre du projet européen ALFA-BIRD, nous avons effectué des expériences sur l'oxydation d'un GTL, CTL (respectivement fabriqué par Shell et Sasol) et d'un mélange GTL/hexan-1-ol (80/20, v/v) préparé au laboratoire. Nous avons observé que l'introduction de biocarburant dans le kérosène de synthèse était possible sans changer significativement sa réactivité.

Ensuite, des mécanismes cinétiques adaptés aux composés étudiés (hydrocarbures lourds, carburants reformulés et carburants de synthèse) ont été développés et validés sur la base des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux.

Le mécanisme cinétique utilisé pour simuler l'oxydation du kérosène conventionnel a initialement été élaboré par Diévart [1] lors de ces travaux de thèse portant sur l'oxydation de carburants typés gazole. Ce mécanisme regroupe les sous-mécanismes nécessaires pour la modélisation du kérosène conventionnel Jet A-1 (n-décane, n-propylcyclohexane et n-butylbenzène). Ces trois composés représentent respectivement les paraffines, les naphtènes et les hydrocarbures aromatiques présents dans le kérosène. Dans ce travail nous avons utilisé le

n-décane pour représenter les paraffines car lors de l'oxydation du n-undécane et du n-dodécane nous avons remarqué qu'ils présentaient tous sensiblement les mêmes profils de concentration.

Un mécanisme cinétique d'oxydation des hydrocarbures lourds a été également développé sur la base des travaux de Diévart [1]. Nous avons introduit de nouvelles espèces dans le mécanisme puis calculés leurs données thermodynamiques via le logiciel THERGAS [2]. Le mécanisme cinétique élaboré pour la simulation de l'oxydation du n-dodécane a été également validé dans les conditions du tube à choc grâce aux résultats expérimentaux de Vasu *et al* [3] et de Davidson *et al* [4].

Pour modéliser l'oxydation des carburéacteurs reformulés, nous avons élaboré un mécanisme cinétique composé de plusieurs sous mécanismes. Le sous-mécanisme de l'hexan-1-ol est issu des travaux de Togbé *et al* [5] réalisés à ICARE. Pour représenter l'oxydation des esters du mélange Jet A-1/RME (90/10, m/m), nous avons utilisé le sous-mécanisme de l'octanoate de méthyle, basé sur les travaux de Dayma *et al* [6-8].

Pour la simulation de l'oxydation des carburéacteurs de synthèse, nous avons introduit le sous-mécanisme d'oxydation de l'iso-octane, choisi pour représenter les iso-paraffines présentes en grande quantité dans les kérosènes paraffiniques de synthèse. Le sous-mécanisme de l'iso-octane est issu des travaux de Dagaut et Togbé [9, 10]. Cependant les résultats obtenus indiquent qu'à cause de son degré de ramification élevé, l'iso-octane ne représente pas bien la fraction d'iso-paraffine présente dans le carburant synthétique. L'utilisation d'une iso-paraffine moins ramifiée telle qu'un méthylnonane ou un méthyldécane devrait améliorer la qualité des modélisations cinétiques.

Nous avons aussi effectué une analyse de vitesse afin d'identifier les réactions responsables de la consommation d'un hydrocarbure lourd (n-undécane) et de la formation des produits. Les réactions de métathèse avec les radicaux hydroxyles prédominent à basse température tandis qu'à haute température ce sont les réactions de rupture de liaisons qui prédominent.

Les mécanismes développés dans cette étude fournissent des résultats satisfaisants, mais nécessitent tout de même des améliorations afin de mieux prévoir la formation des produits intermédiaires, en particulier. Afin d'améliorer les prédictions du modèle, en particulier le modèle d'oxydation des kérosènes de synthèse, il semble nécessaire de définir des mélanges

plus représentatifs (carburant-modèle). Afin de mieux assoir la validité des modèles cinétiques proposés, il serait aussi profitable de les tester dans d'autres conditions expérimentales (tube à choc, machine à compression rapide, flamme) lorsque les données expérimentales seront disponibles. Les méthodes d'estimation des constantes de vitesse de plusieurs classes de réactions (isomérisations, décompositions) pourraient aussi être améliorées grâce à l'utilisation d'outils de chimie quantique.

Références bibliographiques

[1] P. Diévart

Oxydation en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Étude expérimentale en réacteur auto-agité et modélisation, Thèse, Université d'Orléans 2008

[2] C. Muller, V. Michel, G. Scacchi and G. M. Come

THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data molecules and free radicals in the gas phase, Journal de Chimie physique et Physico-Chimie Biologique, 1995, vol 92, pp. 1154-1178

[3] S. S. Vasu, D. F. Davidson, Z. Hong, V. Vasudevan and R. K. Hanson

n-Dodecane oxidation at high-pressures: Measurements of ignition delay times and OH concentration time-histories, Proceedings on the Combustion Institute, 2009, vol. 32, pp. 173-180

[4] D. F. Davidson, Z. Hong, G. L. Pilla, A. Farooq, R. D. Cook and R. K. Hanson

Multi-species time-history measurements during n-dodecane oxidation behind reflected shock waves, Proceedings of the Combustion Institute, 2011, vol. 33, pp. 151–157

[5] C. Togbé, P. Dagaut, A. Mzé-Ahmed and P. Diévart

Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of 1-Hexanol Oxidation in a Pressurized Jet-Stirred Reactor and a Combustion Bomb, Energy and Fuels, 2010, vol. 24, pp. 5859-5875

[6] G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

Experimental and kinetic modelling study of the oxidation of methyl hexanoate, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 1469-1479

[7] G. Dayma, C. Togbé and P. Dagaut

Detailed kinetic mechanism for the oxydation of vegetable oil methyl esters: new evidence from methyl heptanoate, Energy and Fuels, 2009, vol. 23, pp. 4254-4268

[8] C. Togbé, G. Dayma, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experiment and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of simple Biodiesel-Biobutanol Surrogates: Methyl octanoate-Butanol Mixtures, Energy and Fuels, 2010, vol. 24, pp. 3906-3916

[9] P. Dagaut and C. Togbe

Experimental and Modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol-gasoline Surrogate Mixtures (E85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3499-3505

[10] C. Togbé, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experimental and Modeling Study of the Kinetics of Oxidation of Methanol-Gasoline Surrogate Mixtures (M85 Surrogate) in a Jet-Stirred Reactor, Energy and Fuels, 2009, vol. 23, pp. 1936-1941

7 ANNEXES

Annexe I : ***Caractéristiques des appareils utilisés***

Annexe II : ***Composition chimique d'un kérosène de synthèse***

Annexe III : ***Différents vols effectués avec du carburant alternatif***

Annexe IV : ***Mécanisme cinétique et propriétés thermodynamiques***

A-I : Caractéristiques des appareils d'analyses utilisés

L'analyse des espèces réactives, intermédiaires et des produits de combustion obtenus lors des différentes oxydations a été effectuée à partir de quatre chromatographes et d'un spectroscope IRTF.

Chromatographe	**Colonnes**	**Gaz vecteur**	**Programmation de température**	**Détecteur**	**Espèces détectées**
VARIAN 3300	CP-Carboplot P7 L = 25 m D_{int} = 0,53 mm D_f = 50 µm	N_2 15 mL.mn^{-1}	T = 50°C t = 5 mn isotherme	TCD	H_2, O_2
VARIAN 3400	CP-Al_2O_3/KCL L = 50 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 5 µm	H_e 1,5 mL.mn^{-1}	T_i = 70°C t_i = 0 mn v = 10°C/mn T_f = 200°C t_f = 22 mn	FID	HC<C_7
VARIAN CP 3800	DB-624 L = 30 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 1,80 µm	H_e 0,7 mL.mn^{-1}	T_i=70°C t_i=0 mn v_1 = 7°C/mn T_1= 140°C t_1=12mn v_2 = 2°C/mn T_2=200°C t_i = 6 mn v_3 = 20°C/mn T_f=250°C t_f = 5 mn	FID + 1200MS	HC Oxygénés
VARIAN 3800	DB-5MS L = 50 m D_{int} = 0,25 mm D_f = 1 µm	H_e 1 mL.mn^{-1}	T_i = 50°C t_i = 5 mn v=10°C/mn T_f = 150°C t_f = 10 mn	FID + Saturn 2000 (MS)	Analyse en ligne HC + oxygénés

Tableau AI-1 : Caractéristiques des quatre chromatographes utilisés

Spectroscopie IRTF

Cette méthode d'analyse en ligne permet d'identifier et de quantifier des espèces telles que le monoxyde de carbone (CO), le dioxyde de carbone (CO_2), la vapeur d'eau (H_2O), le formaldéhyde (CH_2O) et quelques hydrocarbures légers tels que le méthane (CH_4), l'acétylène (C_2H_2) et l'éthylène (C_2H_4).

Les paramètres d'acquisition utilisés sont indiqués dans le tableau ci-dessous.

Type	Nicolet Magna 550
Pression de prélèvement	500 mB
Température de la cellule	120 °C
Chemin optique	2 m
Balayages	32 scans
Résolution	1 cm^{-1}
Vitesse du miroir	0,6329 cm/s
Zero filling	0 niveau
Apodisation	Happ-Genzel
Temps d'acquisition	73 secondes

Tableau AI-2 : Paramètres d'acquisition (IRFT)

A-II : Composition chimique d'un kérosène de synthèse

La figure ci-dessous présente la composition chimique d'un kérosène synthétique produit par la synthèse Fischer-Tropsch (F-T) à partir du gaz naturel. L'analyse a été effectuée en chromatographie en phase gazeuse (CPG) couplée à un spectromètre de masse (SM).

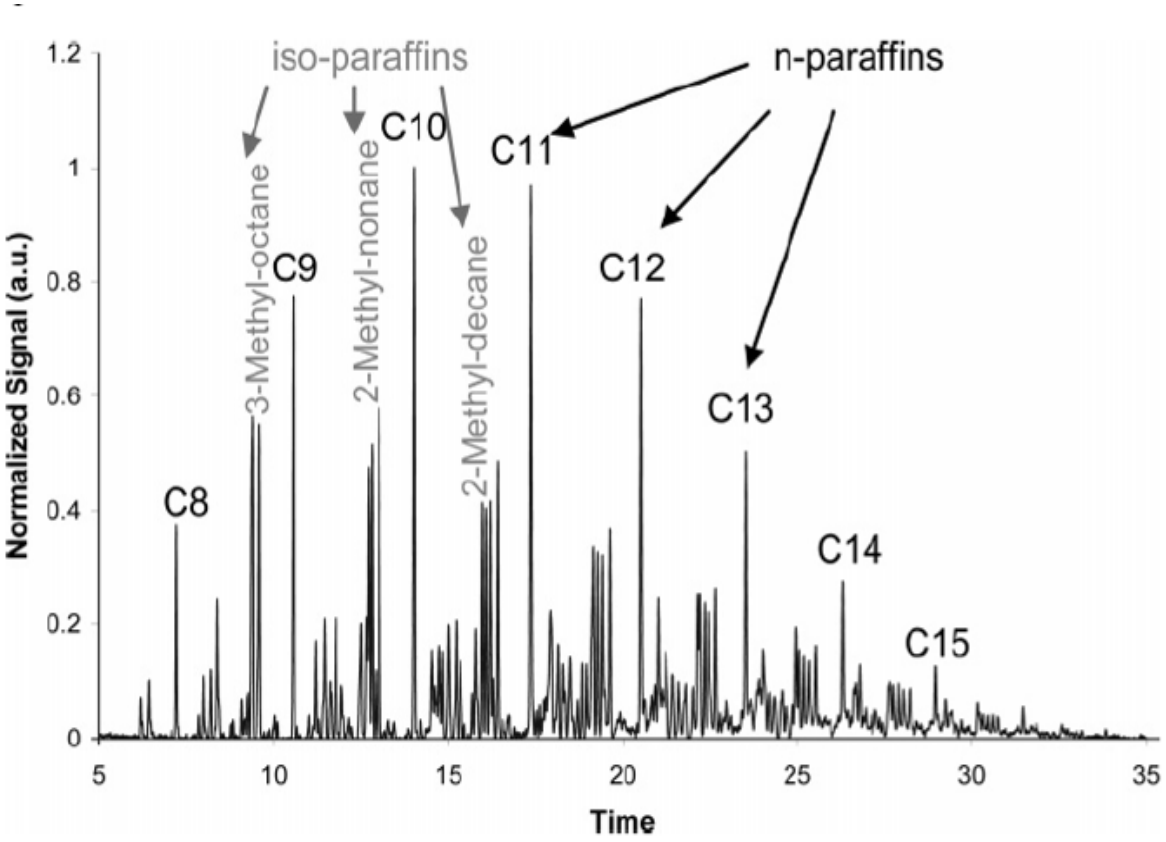


Figure AII-1 : Analyse d'un échantillon de kérosène de synthèse [1]

Le chromatogramme ci-dessus confirme la forte présence des iso-paraffines et des n-paraffines dans le kérosène de synthèse.

Le Tableau AII.1 détaille la composition du kérosène de synthèse S-8 [2]. On observe la présence d'iso-paraffines peu ramifié et d'hydrocarbures lourds tels que le n-décane, le n-undécane, le n-dodécane et le n-tétradécane.

No.	Component name	mol%
1	2-Methyl heptane	0.62
2	3-Methyl heptane	0.84
3	1,2,3-Trimethyl cyclopentane	1.85
4	2,5-Dimethyl heptane	2.17
5	4-Methyl octane	4.80
6	3-Methyl octane	2.53
7	*n*-Nonane	3.11
8	3,5-Dimethyl octane	1.98
9	2,6-Dimethyl octane	1.45
10	4-Ethyl octane	1.98
11	4-Methyl nonane	3.65
12	2-Methyl nonane	1.95
13	3-Methyl nonane	2.65
14	*n*-Decane	3.93
15	2-5-Dimethyl nonane	2.25
16	5-Ethyl-2-methyl octane	1.94
17	5-Methyl decane	2.52
18	4-Methyl decane	2.17
19	2-Methyl decane	2.93
20	3-Methyl decane	3.03
21	*n*-Undecane	4.64
22	*x*-Methyl undecane	3.05
23	3-Methyl undecane	2.20
24	5-Methyl undecane	3.25
25	4-Methyl undecane	2.00
26	2-Methyl undecane	2.05
27	2,3-Dimethyl undecane	2.32
28	*n*-Dodecane	4.97
29	4-Methyl dodecane	1.78
30	*x*-Methyl dodecane	1.43
31	2-Methyl dodecane	2.48
32	*x*-Methyl dodecane	2.45
33	*n*-Tridecane	3.33
34	4-Methyl tridecane	1.60
35	6-Propyl tridecane	2.02
36	*x*-Methyl tridecane	2.04
37	*n*-Tetradecane	2.99
38	*x*-Methyl tetradecane	2.30
39	5-Methyl tetradecane	1.38
40	*n*-Pentadecane	1.98
41	*x*-Methyl tetradecane	1.39

Tableau AII-1 : Composition du kérosène de synthèse S-8 (% molaire) [2]

La figure ci-dessous présente la composition volumique, en terme de familles chimiques, des carburéacteurs de synthèse CTL et GTL issus de la synthèse Fischer-Tropsch.

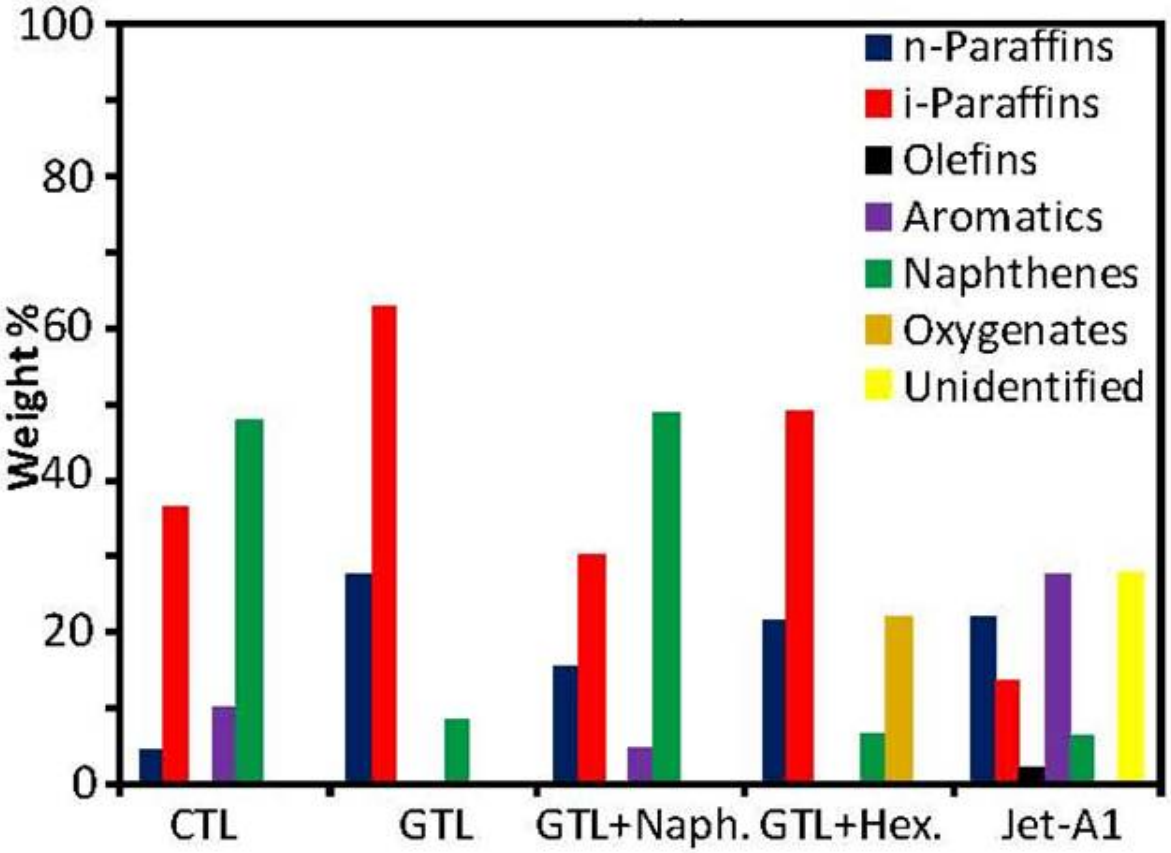


Figure AII-2 : FT Jet Fuel : Composition

source, IFP (FP7, Alfabird project)

CTL: coal to liquid ; GTL: gas to liquid

A-III : Différents vols effectués avec du carburant alternatif

Date	Airline	Aircraft	Engine	Partner / fuel supplier	Source of liquid jet fuel blend
Sep 2006	US Air Force	B52 Stratofortress	TF33	Syntroleum	50% natural gas
Dec 2006	US Air Force	C17 Globemaster III	F117-PW-100	Shell	50% natural gas
Feb 2008	Virgin Atlantic	B747-400	GE CF6-80C2	Imperium Renewables, Boeing	20% coconut and babassu
Feb 2008	Airbus	A380	Rolls-Royce Trent 900	Shell International Petroleum, Qatar Fuel	40% natural gas
Dec 2008	Air New Zealand	B747-400	Rolls-Royce RB211-524G	UOP, Terasol, Boeing	50% jatropha
Jan 2009	Continental Airlines	B737-800	CFM International CFM56-7B	UOP, Terasol, Sapphire Energy, Boeing	47.5% jatropha, 2.5% algae
Jan 2009	Japan Airlines	B747-300	Pratt & Whitney JT9D-7R4G2	Nikki Universal/ UOP, Sustainable Oils, Boeing	42% camelina, 7.5% jatropha, 0.5% algae
Oct 2009	Qatar Airways	A340-600	Rolls-Royce Trent	Airbus, Shell	50% natural gas
Nov 2009	KLM	B747-400	GE	GE, Honeywell UOP	50% camelina
Apr 2010	United	A319	-	Rentech	40% natural gas
Mar 2010	US Air Force	A10C Thunderbolt II	TF34-GE-100 Turbofan	UOP, Sustainable Oils	50% camelina blend
Apr 2010	US Navy	F/A-18 'Green Hornet'	F414-GE-400	Sustainable Oils, Honeywell UOP, Boeing	50% camelina blend
Jun 2010	Royal Netherlands Air Force	AH-64D Apache Helicopter	-	UOP, Boeing	Algae and used cooking oil
Aug 2010	US Air Force	C17 Globemaster III	F117-PW-100	UOP, Boeing	25% tallow
Nov 2010	TAM Airlines	A320	CFM International	UOP	50% jatropha

Tableau AIII-1 : Résumé non exhaustif des récentes démonstrations effectuées avec du carburant alternatif [3]

Références bibliographiques

[1] M. S. P. Kahandalawa, M. J. Dewitt, E. Corporan and S. S. Sidhu

Ignition and Emission Characteristics of Surrogate and Practical Jet Fuels, Energy and Fuels, 2008, vol. 22, pp. 3673-3679

[2] C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, A. Modak, E. Meeks, Y. L. Wang, Q. Feng and T. T. Tsotsis

Detailed chemical kinetic mechanism for surrogates of alternative jet fuels, Combustion and Flame, 2011, vol. 158, pp. 434-445

[3] Sustainable Aviation Fuel Road Map

Flight path to sustainable aviation, 2011

A-IV : Mécanisme cinétique et propriétés thermodynamiques

CHEMKIN INTERPRETER OUTPUT: CHEMKIN-II Version 3.9 Aug. 1994
DOUBLE PRECISION

ELEMENTS CONSIDERED	ATOMIC WEIGHT
1. c	12.0120
2. h	1.00797
3. o	15.9994
4. n	14.0067
5. ar	39.9500

SPECIES CONSIDERED	PHASE	CHARGE	MOLECULAR WEIGHT	TEMPERATURE LOW	TEMPERATURE HIGH	ELEMENT COUNT c	h	o	n	ar
1. h2	G	0	2.01594	300	5000	0	2	0	0	0
2. o2	G	0	31.99880	200	6000	0	0	2	0	0
3. co	G	0	28.01140	300	5000	1	0	1	0	0
4. co2	G	0	44.01080	300	5000	1	0	2	0	0
5. ch2o	G	0	30.02734	300	5000	1	2	1	0	0
6. c2h4	G	0	28.05588	300	5000	2	4	0	0	0
7. ch4	G	0	16.04388	300	5000	1	4	0	0	0
8. c2h6	G	0	30.07182	300	5000	2	6	0	0	0
9. c2h2	G	0	26.03994	300	5000	2	2	0	0	0
10. c3h8	G	0	44.09976	300	5000	3	8	0	0	0
11. c3h6	G	0	42.08382	300	5000	3	6	0	0	0
12. c4h10	G	0	58.12770	300	5000	4	10	0	0	0
13. c4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
14. nc5h12	G	0	72.15564	300	5000	5	12	0	0	0
15. ic4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
16. c5h10	G	0	70.13970	200	6000	5	10	0	0	0
17. c6h14	G	0	86.18358	300	5000	6	14	0	0	0
18. c6h12-1	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
19. ch3hco	G	0	44.05528	300	5000	2	4	1	0	0
20. ethco	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
21. acrol	G	0	56.06728	300	5000	3	4	1	0	0
22. c4h6	G	0	54.09582	300	3000	4	6	0	0	0
23. c6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
24. nc3h7hco	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
25. nc4h9hco	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
26. c5h11hco	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
27. ch3oh	G	0	32.04328	300	5000	1	4	1	0	0
28. c2h4o	G	0	44.05528	300	5000	2	4	1	0	0
29. pbz	G	0	120.20364	300	3000	9	12	0	0	0
30. pch	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
31. h2o	G	0	18.01534	300	5000	0	2	1	0	0
32. CPD	G	0	66.10782	200	6000	5	6	0	0	0
33. chxone	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
34. chxe2oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
35. chxe3oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
36. cyc6h10	G	0	82.15170	300	5000	6	10	0	0	0
37. che24one	G	0	94.11922	300	5000	6	6	1	0	0
38. chxoqjB	G	0	129.14193	300	5000	6	9	3	0	0
39. aceton	G	0	58.08322	200	6000	3	6	1	0	0
40. c2h5coc2h3	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
41. mche1	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
42. toluen	G	0	92.14776	200	6000	7	8	0	0	0
43. phc2h5	G	0	106.17570	300	3000	8	10	0	0	0
44. styren	G	0	104.15976	300	5000	8	8	0	0	0
45. c6h5oh	G	0	94.11922	300	4000	6	6	1	0	0
46. phhco	G	0	106.13122	300	5000	7	6	1	0	0
47. isope	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
48. h	G	0	1.00797	300	5000	0	1	0	0	0
49. o	G	0	15.99940	300	5000	0	0	1	0	0
50. oh	G	0	17.00737	200	6000	0	1	1	0	0
51. Mec8oor	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
52. ho2	G	0	33.00677	300	5000	0	1	2	0	0
53. h2o2	G	0	34.01474	300	5000	0	2	2	0	0
54. n2	G	0	28.01340	300	5000	0	0	0	2	0
55. ar	G	0	39.95000	300	5000	0	0	0	0	1
56. ch3	G	0	15.03591	300	5000	1	3	0	0	0
57. ch2	G	0	14.02794	300	5000	1	2	0	0	0
58. sch2	G	0	14.02794	300	4000	1	2	0	0	0
59. ch	G	0	13.01997	300	5000	1	1	0	0	0
60. C	G	0	12.01200	300	5000	1	0	0	0	0
61. ch3o	G	0	31.03531	300	5000	1	3	1	0	0
62. ch2oh	G	0	31.03531	300	5000	1	3	1	0	0
63. hco	G	0	29.01937	300	5000	1	1	1	0	0
64. ch3o2	G	0	47.03471	300	5000	1	3	2	0	0
65. ch3o2h	G	0	48.04268	300	5000	1	4	2	0	0
66. o2cho	G	0	61.01817	300	5000	1	1	3	0	0
67. ho2cho	G	0	62.02614	300	5000	1	2	3	0	0
68. ocho	G	0	45.01877	300	5000	1	1	2	0	0
69. hocho	G	0	46.02674	300	5000	1	2	2	0	0
70. hoch2o	G	0	47.03471	300	5000	1	3	2	0	0
71. c2h5	G	0	29.06385	300	5000	2	5	0	0	0
72. c2h3	G	0	27.04791	300	5000	2	3	0	0	0
73. c2h	G	0	25.03197	300	5000	2	1	0	0	0
74. c2	G	0	24.02400	300	5000	2	0	0	0	0
75. c2o	G	0	40.02340	300	5000	2	0	1	0	0
76. ch3co	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
77. ch2hco	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
78. ch2co	G	0	42.03934	300	5000	2	2	1	0	0
79. hcco	G	0	41.03137	300	5000	2	1	1	0	0
80. ch3co2	G	0	59.04671	300	5000	2	3	2	0	0
81. ch3co3	G	0	75.04611	300	5000	2	3	3	0	0
82. ch3co3h	G	0	76.05408	300	5000	2	4	3	0	0
83. c2h5oh	G	0	46.07122	300	5000	2	6	1	0	0
84. c2h5o	G	0	45.06325	300	5000	2	5	1	0	0
85. c2h5o2	G	0	61.06265	300	5000	2	5	2	0	0
86. c2h5o2h	G	0	62.07062	300	5000	2	6	2	0	0
87. c2h4o2h	G	0	61.06265	300	5000	2	5	2	0	0
88. c2h2oh	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
89. hccoh	G	0	42.03934	300	4000	2	2	1	0	0
90. chocho	G	0	58.03874	300	5000	2	2	2	0	0
91. choco	G	0	57.03077	300	5000	2	1	2	0	0
92. c2h3o	G	0	43.04731	300	5000	2	3	1	0	0
93. pc2h4oh	G	0	45.06325	300	5000	2	5	1	0	0
94. o2c2h4oh	G	0	77.06205	300	5000	2	5	3	0	0
95. ch3choh	G	0	45.06325	300	5000	2	5	1	0	0
96. nc3h7	G	0	43.09179	300	5000	3	7	0	0	0
97. ic3h7	G	0	43.09179	300	5000	3	7	0	0	0
98. ac3h5	G	0	41.07585	300	5000	3	5	0	0	0
99. tc3h5	G	0	41.07585	300	4000	3	5	0	0	0
100. sc3h5	G	0	41.07585	300	5000	3	5	0	0	0
101. pc3h4	G	0	40.06788	300	5000	3	4	0	0	0
102. ac3h4	G	0	40.06788	300	5000	3	4	0	0	0
103. c3h3	G	0	39.05991	300	5000	3	3	0	0	0
104. c3h2	G	0	38.05194	300	5000	3	2	0	0	0
105. nc3h7o	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
106. nc3h7oh	G	0	60.09916	300	5000	3	8	1	0	0
107. ic3h7o	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
108. c3h6o	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
109. c3h6o1-3	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
110. c3h5o	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
111. c3h4oh	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
112. c3h4o2h	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
113. c3h4o	G	0	56.06728	300	5000	3	4	1	0	0
114. c3h3o	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
115. c3h5o2h	G	0	74.08262	300	5000	3	6	2	0	0
116. c3h5e1q2	G	0	74.08262	300	5000	3	6	2	0	0
117. c2h5co	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
118. c2h3co	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
119. ch2coch3	G	0	57.07525	200	6000	3	5	1	0	0
120. c3h5oh	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
121. c3h6oh	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
122. o2c3h6oh	G	0	91.08999	300	5000	3	7	3	0	0
123. ch3chco	G	0	56.06728	300	5000	3	4	1	0	0
124. ch2ch2hco	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
125. o2c2h4hco	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
126. ho2c2h4co	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
127. ho2c2h4hco	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
128. oc2h4hco	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
129. ch3cocho	G	0	72.06668	300	5000	3	4	2	0	0
130. ch3coco	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
131. ch2cohco	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
132. hcoch2hco	G	0	72.06668	300	5000	3	4	2	0	0
133. hcoch2co	G	0	71.05871	300	5000	3	3	2	0	0
134. ch3coch2o2	G	0	89.07405	300	5000	3	5	3	0	0
135. ch3coch2o	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
136. ch3coch2o2h	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
137. propynal	G	0	54.05134	300	5000	3	2	1	0	0
138. c2hco	G	0	53.04337	300	5000	3	1	1	0	0
139. ic4h9	G	0	57.11973	300	5000	4	9	0	0	0
140. tc4h9	G	0	57.11973	300	5000	4	9	0	0	0
141. ic4h7	G	0	55.10379	300	3000	4	7	0	0	0
142. c4h4o	G	0	68.07928	300	5000	4	4	1	0	0
143. c3h4hco	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
144. c3h3hco	G	0	68.07928	300	5000	4	4	1	0	0
145. c3h3co	G	0	67.07131	300	5000	4	3	1	0	0
146. pc4h9	G	0	57.11973	200	6000	4	9	0	0	0
147. sc4h9	G	0	57.11973	200	6000	4	9	0	0	0
148. t2c4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
149. c2c4h8	G	0	56.11176	300	5000	4	8	0	0	0
150. Ac4h7-1	G	0	55.10379	300	5000	4	7	0	0	0
151. Cc4h7-1	G	0	55.10379	300	3000	4	7	0	0	0
152. Dc4h7-1	G	0	55.10379	300	5000	4	7	0	0	0
153. butyne	G	0	54.09582	300	5000	4	6	0	0	0
154. butyn2	G	0	54.09582	300	5000	4	6	0	0	0
155. meall	G	0	54.09582	300	3000	4	6	0	0	0
156. ic4h5	G	0	53.08785	300	5000	4	5	0	0	0
157. nc4h5	G	0	53.08785	300	5000	4	5	0	0	0
158. c4h4	G	0	52.07988	300	4000	4	4	0	0	0
159. nc4h3	G	0	51.07191	300	5000	4	3	0	0	0
160. ic4h3	G	0	51.07191	300	5000	4	3	0	0	0
161. c4h2	G	0	50.06394	300	5000	4	2	0	0	0
162. c3h7co	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
163. c4h7oh	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
164. ac3h5hco	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
165. ac3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
166. c2h3chcho	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
167. c4h8o2	G	0	88.11056	300	5000	4	8	2	0	0
168. butanone	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
169. mvk	G	0	70.09522	300	5000	4	6	1	0	0
170. ch2coc2h3	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
171. mhd	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
172. h2c4o	G	0	66.06334	300	5000	4	2	1	0	0
173. c4h	G	0	49.05597	300	5000	4	1	0	0	0
174. c4h6o2h	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
175. hoc4h6	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
176. ch3chch2hco	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
177. c3h6cho-1	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
178. ch3coc2h4p	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
179. ch3coc2h4o2	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
180. ch3coc2h4o2h	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
181. ch3coc2h4o	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
182. c2h5coch2	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
183. c2h5coch2o2	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
184. c2h5coch2o2h	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
185. c2h5coch2o	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
186. c4h7hco-1	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
187. c4h7co-1	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
188. c4h8hco-2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
189. c4h7hco-2	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
190. c4h7co-2	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
191. Ac5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
192. Bc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
193. Cc5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
194. c2c5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
195. t2c5h10	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
196. Ac5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
197. Bc5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
198. Cc5h9-1	G	0	69.13173	200	6000	5	9	0	0	0
199. Dc5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
200. Ec5h9-1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
201. Dc5h9-2	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
202. nc4h9co	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
203. c3h7coch3	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
204. c5h9oh	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
205. c5h8-12	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
206. c5h8-13	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
207. c5h8-14	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
208. c5h7	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
209. ch3coc3h6o2-1	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
210. ch3coc3h6o2h-1	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
211. ch3coc3h6o-1	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
212. isoph	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
213. isopy	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
214. Ac6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
215. Bc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
216. Cc6h13	G	0	85.17561	300	5000	6	13	0	0	0
217. c6h12-2	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
218. c6h12-3	G	0	84.16764	200	6000	6	12	0	0	0
219. Cc6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
220. Fc6h11-1	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
221. Ac6h11-3	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
222. Bc6h11-3	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0

223.	c6h10-13	G	0	82.15170	200	6000	6	10	0	0	0
224.	c6h10-15	G	0	82.15170	300	5000	6	10	0	0	0
225.	c6h9	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
226.	c5h11co	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
227.	nc7h16	G	0	100.21152	300	5000	7	16	0	0	0
228.	Ac7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
229.	Bc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
230.	Cc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
231.	Dc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
232.	c7h14-1	G	0	98.19558	200	6000	7	14	0	0	0
233.	c7h14-2	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
234.	c7h14-3	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
235.	c7h12-13	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
236.	c7h12-16	G	0	96.17964	300	5000	7	12	0	0	0
237.	Cc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
238.	Dc7h13-2	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
239.	Ec7h13-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
240.	Dc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
241.	Ac7h13-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
242.	c6h13hco	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
243.	c6h13co	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
244.	c7h14rohAB	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
245.	c7h14qjohAB	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
246.	c7h14rohBC	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
247.	c7h14qjohBC	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
248.	c7h14rohCD	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
249.	c7h14qjohCD	G	0	147.20175	300	5000	7	15	3	0	0
250.	p2c4h614	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
251.	p2c4h513	G	0	96.17964	300	3000	7	12	0	0	0
252.	P2c4h4134	G	0	95.17167	300	3000	7	11	0	0	0
253.	nc8h18	G	0	114.23946	200	6000	8	18	0	0	0
254.	Ac8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
255.	Bc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
256.	Cc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
257.	Dc8h17	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
258.	c8h16-1	G	0	112.22352	200	6000	8	16	0	0	0
259.	c8h16-2	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
260.	c8h16-3	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
261.	c8h16-4	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
262.	Cc8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
263.	Hc8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
264.	Dc8h15-2	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
265.	Ec8h15-3	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
266.	c8h14	G	0	110.20758	300	5000	8	14	0	0	0
267.	c8h16rohAB	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
268.	c8h16rohBC	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
269.	c8h16rohCD	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
270.	c8h16rohDE	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
271.	c8h16qjohAB	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
272.	c8h16qjohBC	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
273.	c8h16qjohCD	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
274.	c8h16qjohDE	G	0	161.22969	300	5000	8	17	3	0	0
275.	c7h15hco	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
276.	c7h15co	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
277.	nc9h20	G	0	128.26740	200	6000	9	20	0	0	0
278.	Ac9h19	G	0	127.25943	200	6000	9	19	0	0	0
279.	Bc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
280.	Cc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
281.	Dc9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
282.	Ec9h19	G	0	127.25943	300	5000	9	19	0	0	0
283.	c9h18-1	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
284.	c9h18-2	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
285.	c9h18-3	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
286.	c9h18-4	G	0	126.25146	300	5000	9	18	0	0	0
287.	Cc9h17-1	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
288.	Dc9h17-2	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
289.	Ec9h17-3	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
290.	Fc9h17-4	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
291.	c9h16	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
292.	c8h17hco	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
293.	c8h17co	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
294.	nc10h22	G	0	142.29534	200	6000	10	22	0	0	0
295.	Ac10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
296.	Bc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
297.	Cc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
298.	Dc10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
299.	Ec10h21	G	0	141.28737	300	5000	10	21	0	0	0
300.	c10h20-1	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
301.	c10h20-2	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
302.	c10h20-3	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
303.	c10h20-4	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
304.	c10h20-5	G	0	140.27940	300	5000	10	20	0	0	0
305.	Cc10h19-1	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
306.	Dc10h19-2	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
307.	Ec10h19-3	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
308.	Fc10h19-4	G	0	139.27143	300	5000	10	19	0	0	0
309.	c10h20rohAB	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
310.	c10h20qjohAB	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
311.	c10h20rohBC	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
312.	c10h20qjohBC	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
313.	c10h20rohCD	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
314.	c10h20qjohCD	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
315.	c10h20rohDE	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
316.	c10h20qjohDE	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
317.	c10h20rohEF	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
318.	c10h20qjohEF	G	0	189.28557	300	5000	10	21	3	0	0
319.	cyc6h12	G	0	84.16764	300	5000	6	12	0	0	0
320.	cyc6h11	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
321.	cyc6h9	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
322.	Bchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
323.	Cchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
324.	Dchxone	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
325.	Dchxe2oA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
326.	Fc6e1oC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
327.	c6e5oA	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
328.	c6e5oyA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
329.	Ac6e5oC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
330.	Ac6e5oB	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
331.	Ac6e3e5oB	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
332.	mch	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
333.	mchA	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
334.	mchB	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
335.	Amche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
336.	Cmche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
337.	Dmche1	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
338.	BmchohA	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
339.	mchohAqjB	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
340.	mche13	G	0	94.16370	300	5000	7	10	0	0	0
341.	mche14	G	0	94.16370	300	5000	7	10	0	0	0
342.	Emche13	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
343.	Gmche13	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
344.	Fmche14	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
345.	Gmche14	G	0	93.15573	300	5000	7	9	0	0	0
346.	mche135	G	0	92.14776	300	5000	7	8	0	0	0
347.	mche136	G	0	92.14776	300	5000	7	8	0	0	0
348.	mche1oC	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
349.	mchoA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
350.	mche2oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
351.	chxco	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
352.	mche2oya	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
353.	mchoAoC	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
354.	mchoyAoC	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
355.	mchoAoD	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
356.	mchoyAoD	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
357.	AmchoD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
358.	AmchoC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
359.	Gc7h13-1	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
360.	c7e6oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
361.	Gc7e1oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
362.	Ec5e1oC	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
363.	Ac7e6oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
364.	Gc7e1oD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
365.	Ac5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
366.	Gc7e1oF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
367.	c6h7C	G	0	79.12779	300	5000	6	7	0	0	0
368.	Lc6h7	G	0	79.12779	300	5000	6	7	0	0	0
369.	Lc6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
370.	Lc6h4	G	0	76.10388	300	5000	6	4	0	0	0
371.	U-c6h5	G	0	77.11185	300	5000	6	5	0	0	0
372.	chxe1rD	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
373.	chd13	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
374.	chd14	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
375.	cyc6h9o	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
376.	Fc6e3oAoE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
377.	Dc6e5oAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
378.	Fc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
379.	Fc6e2oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
380.	Fc6h9-13	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
381.	hex135	G	0	80.13576	300	5000	6	8	0	0	0
382.	sc3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
383.	Ac6h9-15	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
384.	c5h5	G	0	65.09985	200	6000	5	5	0	0	0
385.	c5h4oh	G	0	81.09925	200	6000	5	5	1	0	0
386.	c5h5o	G	0	81.09925	300	3000	5	5	1	0	0
387.	c5h4o	G	0	80.09128	200	6000	5	4	1	0	0
388.	cyc5h7	G	0	67.11579	300	5000	5	7	0	0	0
389.	cyc5h8	G	0	68.12376	200	5000	5	8	0	0	0
390.	hex1245	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
391.	c6h615	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
392.	mc6h6	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
393.	fulvene	G	0	78.11982	300	5000	6	6	0	0	0
394.	c6h5	G	0	77.11185	300	5000	6	5	0	0	0
395.	c6h5o	G	0	93.11125	300	4000	6	5	1	0	0
396.	c6h4o2	G	0	108.10268	300	5000	6	4	2	0	0
397.	c6h5o2	G	0	109.11065	200	6000	6	5	2	0	0
398.	c6h5o2h	G	0	110.11862	200	6000	6	6	2	0	0
399.	c6h3o2	G	0	107.09471	300	5000	6	3	2	0	0
400.	c6h3o3	G	0	123.09411	300	5000	6	3	3	0	0
401.	c5h4	G	0	64.09188	300	5000	5	4	0	0	0
402.	c5h3	G	0	63.08391	300	5000	5	3	0	0	0
403.	phch2	G	0	91.13979	200	6000	7	7	0	0	0
404.	phch2oh	G	0	108.14716	300	5000	7	8	1	0	0
405.	phch2o	G	0	107.13919	300	3000	7	7	1	0	0
406.	phco	G	0	105.12325	300	5000	7	5	1	0	0
407.	hoc6h4ch3	G	0	108.14716	300	5000	7	8	1	0	0
408.	oc6h4ch3	G	0	107.13919	300	5000	7	7	1	0	0
409.	Aphc2h4	G	0	105.16773	300	3000	8	9	0	0	0
410.	Bphc2h4	G	0	105.16773	300	3000	8	9	0	0	0
411.	ASTYRYL	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
412.	BSTYRYL	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
413.	phc2h	G	0	102.14382	300	3000	8	6	0	0	0
414.	c6h4c2h3	G	0	103.15179	300	5000	8	7	0	0	0
415.	phch2hco	G	0	120.15916	300	5000	8	8	1	0	0
416.	phch2co	G	0	119.15119	300	5000	8	7	1	0	0
417.	phcoch2	G	0	119.15119	300	5000	8	7	1	0	0
418.	c6h5cco	G	0	117.13525	300	5000	8	5	1	0	0
419.	pbzjA	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
420.	pbzjB	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
421.	pbzjC	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
422.	BPHPROPY	G	0	119.19567	300	3000	9	11	0	0	0
423.	phc3h5-1	G	0	118.18770	300	5000	9	10	0	0	0
424.	phc3h5-2	G	0	118.18770	300	5000	9	10	0	0	0
425.	phc3h4	G	0	117.17973	300	5000	9	9	0	0	0
426.	phc3h3	G	0	116.17176	300	5000	9	8	0	0	0
427.	phc2h4hco	G	0	134.18710	300	5000	9	10	1	0	0
428.	phc2h4co	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
429.	phch2coch2	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
430.	phcoc2h4	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
431.	phc2h2hco	G	0	132.17116	300	5000	9	8	1	0	0
432.	phc2h2co	G	0	131.16319	300	5000	9	7	1	0	0
433.	phcoc2h3	G	0	132.17116	300	5000	9	8	1	0	0
434.	Bphc3h5ohA	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
435.	Aphc3h5ohB	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
436.	Cphc3h5ohB	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
437.	Bphc3h5ohC	G	0	135.19507	300	5000	9	11	1	0	0
438.	pbzohAqjB	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
439.	pbzohBqjA	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
440.	pbzohBqjC	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
441.	pbzohCqjB	G	0	167.19387	300	5000	9	11	3	0	0
442.	Cophc3h4-1	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
443.	Aophc3h4-2	G	0	133.17913	300	5000	9	9	1	0	0
444.	ch3c6h4c2h3	G	0	118.18770	300	5000	9	10	0	0	0
445.	ch3c6h4c2h5	G	0	120.20364	300	5000	9	12	0	0	0
446.	c14h14	G	0	182.27958	300	3000	14	14	0	0	0
447.	napht	G	0	128.18376	300	5000	10	8	0	0	0
448.	biphenyl	G	0	154.22370	300	5000	12	10	0	0	0
449.	c10h9	G	0	129.19173	200	6000	10	9	0	0	0
450.	c10h10	G	0	130.19970	200	6000	10	10	0	0	0
451.	c6h4c2h	G	0	101.13585	300	3000	8	5	0	0	0
452.	A1c2hAC	G	0	127.17579	300	5000	10	7	0	0	0
453.	A2-X	G	0	127.17579	300	5000	10	7	0	0	0
454.	A2O	G	0	143.17519	300	5000	10	7	1	0	0
455.	A2oh	G	0	144.18316	300	5000	10	8	1	0	0
456.	A1c2h3AC	G	0	129.19173	200	6000	10	9	0	0	0
457.	indenyl	G	0	115.16379	300	3000	9	7	0	0	0
458.	pchA	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
459.	pchB	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
460.	pchC	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
461.	pchD	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
462.	pchE	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
463.	pchF	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
464.	pchG	G	0	125.24349	300	5000	9	17	0	0	0
465.	pchqjA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
466.	pchqjB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0

467.	pchqjC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
468.	pchqjD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
469.	pchqjE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
470.	pchqjF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
471.	pchqjG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
472.	pchqA	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
473.	pchqB	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
474.	pchqC	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
475.	pchqD	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
476.	pchqE	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
477.	pchqF	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
478.	pchqG	G	0	158.25026	300	5000	9	18	2	0	0
479.	pchojA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
480.	pchojB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
481.	pchojC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
482.	pchojD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
483.	pchojE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
484.	pchojF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
485.	pchojG	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
486.	ApchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
487.	BpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
488.	CpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
489.	DpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
490.	EpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
491.	FpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
492.	GpchqA	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
493.	ApchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
494.	BpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
495.	CpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
496.	DpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
497.	EpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
498.	FpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
499.	GpchqB	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
500.	ApchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
501.	BpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
502.	CpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
503.	DpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
504.	EpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
505.	FpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
506.	GpchqC	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
507.	ApchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
508.	BpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
509.	CpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
510.	EpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
511.	FpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
512.	GpchqD	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
513.	ApchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
514.	BpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
515.	CpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
516.	DpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
517.	EpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
518.	FpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
519.	GpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
520.	HpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
521.	ApchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
522.	BpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
523.	CpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
524.	DpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
525.	EpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
526.	FpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
527.	GpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0

528.	ApchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
529.	BpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
530.	CpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
531.	DpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
532.	EpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
533.	FpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
534.	GpchqG	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
535.	IpchqE	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
536.	HpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
537.	IpchqF	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
538.	pchqAqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
539.	pchqAqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
540.	pchqAqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
541.	pchqAqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
542.	pchqAqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
543.	pchqAqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
544.	pchqAqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
545.	pchqBqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
546.	pchqBqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
547.	pchqBqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
548.	pchqBqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
549.	pchqBqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
550.	pchqBqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
551.	pchqBqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
552.	pchqCqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
553.	pchqCqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
554.	pchqCqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
555.	pchqCqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
556.	pchqCqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
557.	pchqCqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
558.	pchqCqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
559.	pchqDqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
560.	pchqDqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
561.	pchqDqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
562.	pchqDqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
563.	pchqDqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
564.	pchqDqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
565.	pchqEqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
566.	pchqEqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
567.	pchqEqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
568.	pchqEqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
569.	pchqEqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
570.	pchqEqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
571.	pchqEqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
572.	pchqEqjH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
573.	pchqEqjI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
574.	pchqFqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
575.	pchqFqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
576.	pchqFqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
577.	pchqFqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
578.	pchqFqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
579.	pchqFqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
580.	pchqFqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
581.	pchqFqjH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
582.	pchqFqjI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
583.	pchqGqjA	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
584.	pchqGqjB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
585.	pchqGqjC	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
586.	pchqGqjD	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
587.	pchqGqjE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
588.	pchqGqjF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0

589.	pchqGqjG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
590.	pchoAqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
591.	pchoAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
592.	pchoAqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
593.	pchoAqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
594.	pchoBqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
595.	pchoBqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
596.	pchoBqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
597.	pchoBqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
598.	pchoBqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
599.	pchoCqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
600.	pchoCqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
601.	pchoCqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
602.	pchoCqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
603.	pchoCqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
604.	pchoCqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
605.	pchoEqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
606.	pchoEqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
607.	pchoEqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
608.	pchoEqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
609.	pchoEqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
610.	pchoEqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
611.	pchoEqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
612.	pchoEqI	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
613.	pchoFqA	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
614.	pchoFqB	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
615.	pchoFqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
616.	pchoFqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
617.	pchoFqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
618.	pchoFqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
619.	pchoFqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
620.	pchoFqI	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
621.	pchoGqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
622.	pchoGqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
623.	pchoGqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
624.	pchoGqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
625.	pchoAojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
626.	pchoAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
627.	pchoAojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
628.	pchoBojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
629.	pchoBojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
630.	pchoBojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
631.	pchoBojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
632.	pchoCojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
633.	pchoCojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
634.	pchoCojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
635.	pchoCojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
636.	pchoCojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
637.	pchoEojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
638.	pchoEojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
639.	pchoEojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
640.	pchoEojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
641.	pchoEojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
642.	pchoEojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
643.	pchoEojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
644.	pchoEojI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
645.	pchoFojA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
646.	pchoFojB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
647.	pchoFojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
648.	pchoFojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
649.	pchoFojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0

650.	pchoFojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
651.	pchoFojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
652.	pchoFojI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
653.	pchoGojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
654.	pchoGojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
655.	pchoGojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
656.	ApchohB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
657.	BpchohA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
658.	BpchohC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
659.	CpchohB	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
660.	CpchohD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
661.	DpchohC	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
662.	DpchohE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
663.	EpchohD	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
664.	EpchohF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
665.	FpchohE	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
666.	FpchohG	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
667.	GpchohF	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
668.	pcho-AB	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
669.	pcho-BC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
670.	pcho-CD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
671.	pcho-DE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
672.	pcho-EF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
673.	pcho-FG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
674.	pcho-AC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
675.	pcho-AD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
676.	pcho-AE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
677.	pcho-AF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
678.	pcho-BD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
679.	pcho-BE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
680.	pcho-BF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
681.	pcho-BG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
682.	pcho-CE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
683.	pcho-CF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
684.	pcho-CG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
685.	pcho-DF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
686.	pcho-DG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
687.	pcho-EG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
688.	pcho-EI	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
689.	pcho-FH	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
690.	pcho-EH	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
691.	ApchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
692.	BpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
693.	ApchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
694.	CpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
695.	DpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
696.	ApchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
697.	EpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
698.	ApchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
699.	FpchoA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
700.	BpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
701.	CpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
702.	DpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
703.	EpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
704.	BpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
705.	BpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
706.	FpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
707.	BpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
708.	GpchoB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
709.	DpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
710.	CpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0

711.	EpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
712.	CpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
713.	FpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
714.	CpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
715.	GpchoC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
716.	DpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
717.	DpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
718.	DpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
719.	EpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
720.	FpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
721.	EpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
722.	GpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
723.	EpchoH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
724.	HpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
725.	IpchoE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
726.	FpchoG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
727.	GpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
728.	HpchoF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
729.	pche1	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
730.	pche2	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
731.	pche3	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
732.	pche4	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
733.	pche5	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
734.	pche6	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
735.	Apche2	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
736.	Dpche2	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
737.	Cpche4	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
738.	Dpche5	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
739.	Epche6	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
740.	Fpche7	G	0	123.22755	300	5000	9	15	0	0	0
741.	pche2ojA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
742.	pche1ojC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
743.	pche2ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
744.	pche3ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
745.	pche4ojC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
746.	pche3ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
747.	pche4ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
748.	pche6ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
749.	pche5ojG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
750.	pche7ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
751.	Ao2pchohB	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
752.	Bo2pchohA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
753.	Bo2pchohC	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
754.	Co2pchohB	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
755.	Co2pchohD	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
756.	Do2pchohC	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
757.	Do2pchohE	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
758.	Eo2pchohD	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
759.	Eo2pchohF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
760.	Fo2pchohE	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
761.	Fo2pchohG	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
762.	Go2pchohF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
763.	pche1e3	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
764.	pche2e4	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
765.	pche3e5	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
766.	pche4e6	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
767.	pche5e7	G	0	122.21958	300	5000	9	14	0	0	0
768.	pchoA	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
769.	pchoyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
770.	pchoB	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
771.	pchoC	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
772.	pchoE	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
773.	pchoF	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
774.	pchoG	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
775.	DpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
776.	FpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
777.	GpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
778.	IpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
779.	DpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
780.	FpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
781.	GpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
782.	HpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
783.	IpchqCqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
784.	DpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
785.	EpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
786.	GpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
787.	HpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
788.	IpchqCqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
789.	ApchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
790.	BpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
791.	CpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
792.	GpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
793.	HpchqDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
794.	BpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
795.	CpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
796.	DpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
797.	FpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
798.	HpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
799.	IpchqEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
800.	BpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
801.	CpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
802.	DpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
803.	FpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
804.	GpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
805.	IpchqEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
806.	BpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
807.	CpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
808.	GpchqEqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
809.	CpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
810.	DpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
811.	EpchqFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
812.	Dc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
813.	Fc9oAoG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
814.	Fc9oAoH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
815.	MeDc8oCoIrH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
816.	MeDc8oBoIrH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
817.	MeEc8oAoFrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
818.	EtDc7oEoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
819.	Fc9oAoE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
820.	MeEc8oDoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
821.	c9oyAoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
822.	EtDc7oAoCrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
823.	EtDc7oAoHrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
824.	MeEc8oAoDrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
825.	EtDc7oCoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
826.	Ac9oBoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
827.	Ac9oDoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
828.	Fc9oAoD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
829.	MeEc8oCoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
830.	MeEc8oAoCrI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
831.	EtDc7oBoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
832.	Ac9oCoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
833.	MeEc8oBoIrA	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
834.	Fc9oAoC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
835.	c9oAoGqjF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
836.	Hc9oAoGqF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
837.	c9oAoGqFqjH	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
838.	c9oAoGoFqH	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
839.	c7oyAoBoG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
840.	c6oyAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
841.	Ec5oA	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
842.	c5oAqjE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
843.	Cc5oAqE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
844.	Bc5oAqE	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
845.	c5oAqEqjC	G	0	149.12873	300	5000	5	9	5	0	0
846.	c5oAqEqjB	G	0	149.12873	300	5000	5	9	5	0	0
847.	c5oAoEqC	G	0	132.12136	300	5000	5	8	4	0	0
848.	c5oAoEqB	G	0	132.12136	300	5000	5	8	4	0	0
849.	Ac7oBoG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
850.	c7oBoGqjA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
851.	Cc7oBoGqA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
852.	Dc7oBoGqA	G	0	159.16927	300	5000	7	11	4	0	0
853.	c7oBoGqAqjC	G	0	191.16807	300	5000	7	11	6	0	0
854.	c7oBoGqAqjD	G	0	191.16807	300	5000	7	11	6	0	0
855.	c7oAoBoGqC	G	0	174.16070	300	5000	7	10	5	0	0
856.	c7oAoBoGqD	G	0	174.16070	300	5000	7	10	5	0	0
857.	EtDc7oEoIqjA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
858.	CEtDc7oEoIqA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
859.	DEtDc7oEoIqA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
860.	EtDc7oEoIqAqjC	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
861.	EtDc7oEoIqAqjD	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
862.	EtDc7oAoEoIqC	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
863.	EtDc7oAoEoIqD	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
864.	Cc6oAoD	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
865.	MeCc6oAoDoG	G	0	142.16190	300	5000	7	10	3	0	0
866.	MeCc6oyAoDoG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
867.	MeCc6oAoDoyG	G	0	141.15393	300	5000	7	9	3	0	0
868.	c6oAoCoF	G	0	128.13396	300	5000	6	8	3	0	0
869.	c6oyAoCoF	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
870.	c6oAoCoyF	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
871.	Ec5oAoD	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
872.	Ec5oAoC	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
873.	MeBc5oAoCrF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
874.	c9oAoCqjF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
875.	Dc9oAoCqF	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
876.	c9oAoCqFqjD	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
877.	c9oAoCoFqD	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
878.	c6oAoC	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
879.	c6oyAoC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
880.	MeEc8oAoCqjI	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
881.	DMeEc8oAoCqI	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
882.	GMeEc8oAoCqI	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
883.	MeEc8oAoCqIqjD	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
884.	MeEc8oAoCqIqjG	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
885.	MeEc8oAoCoIqD	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
886.	MeEc8oAoCoIqG	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
887.	MeBc5oAoF	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
888.	MeBc5oyAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
889.	c9oDoFqjA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
890.	Cc9oDoFqA	G	0	187.22515	300	5000	9	15	4	0	0
891.	c9oDoFqAqjC	G	0	219.22395	300	5000	9	15	6	0	0
892.	c9oAoDoFqC	G	0	202.21658	300	5000	9	14	5	0	0
893.	EtDc7oArI	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
894.	EtDc7oAqjI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
895.	DEtDc7oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
896.	EtDc7oAqIqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
897.	EtDc7oAoIqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
898.	c7oAoD	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
899.	c7oyAoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
900.	EtDc7oIrA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
901.	EtDc7oIqjA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
902.	CEtDc7oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
903.	DEtDc7oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
904.	EtDc7oIqAqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
905.	EtDc7oIqAqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
906.	EtDc7oAoIqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
907.	MeEc8oArI	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
908.	MeEc8oAqjI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
909.	DMeEc8oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
910.	FMeEc8oAqI	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
911.	MeEc8oAqIqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
912.	MeEc8oAqIqjF	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
913.	MeEc8oAoIqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
914.	MeEc8oAoIqF	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
915.	MeCc6oAoG	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
916.	MeCc6oyAoG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
917.	MeCc6oAoyG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
918.	Bc6oAoF	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
919.	MeEc8oIrA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
920.	Fc9oA	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
921.	MeEc8oIqjA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
922.	CMeEc8oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
923.	DMeEc8oIqA	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
924.	MeEc8oIqAqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
925.	MeEc8oIqAqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
926.	MeEc8oAoIqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
927.	c9oAqjF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
928.	Cc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
929.	Dc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
930.	Hc9oAqF	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
931.	c9oAqFqjC	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
932.	c9oAqFqjD	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
933.	c9oAqFqjH	G	0	205.24049	300	5000	9	17	5	0	0
934.	c9oAoFqC	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
935.	c9oAoFqD	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
936.	c9oAoFqH	G	0	188.23312	300	5000	9	16	4	0	0
937.	MeBc5oArF	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
938.	pchoBqjE	G	0	171.22575	300	5000	9	15	3	0	0
939.	CpchoBqE	G	0	171.22575	300	5000	9	15	3	0	0
940.	pchoBqEqjC	G	0	203.22455	300	5000	9	15	5	0	0
941.	pchoBoEqC	G	0	186.21718	300	5000	9	14	4	0	0
942.	pchoEqjB	G	0	171.22575	300	5000	9	15	3	0	0
943.	DpchoEqB	G	0	171.22575	300	5000	9	15	3	0	0
944.	pchoEqBqjD	G	0	203.22455	300	5000	9	15	5	0	0
945.	pchoBoEqD	G	0	186.21718	300	5000	9	14	4	0	0
946.	c7e6oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
947.	Ec7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
948.	c5e4oB	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
949.	Cc5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
950.	c7e6oAoE	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
951.	c7e6oyAoE	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
952.	Dc7oA	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
953.	c7e3oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
954.	c7e4oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0

955.	Cc5e4oA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
956.	c6e5oAo4	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
957.	c6e5oyAo4	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
958.	c5e4oAoC	G	0	98.10662	300	5000	5	6	2	0	0
959.	c5e4oyAoC	G	0	97.09865	300	5000	5	5	2	0	0
960.	c6alCco	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
961.	MeCc6oBoGrA	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
962.	c7e6oAoD	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
963.	c7e6oyAoD	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
964.	c9e5oAoD	G	0	154.21838	300	5000	9	14	2	0	0
965.	c9e5oyAoD	G	0	153.21041	300	5000	9	13	2	0	0
966.	c9e6oAoD	G	0	154.21838	300	5000	9	14	2	0	0
967.	c9e6oyAoD	G	0	153.21041	300	5000	9	13	2	0	0
968.	Ac8e5oC	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
969.	c6e5oAoC	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
970.	c6e5oyAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
971.	Gic7al	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
972.	Ac6oC	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
973.	Gpc7al	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
974.	Bc5oA	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
975.	ch2coch2hco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
976.	c7e6oAoC	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
977.	c7e6oyAoC	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
978.	Cc6oA	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
979.	Ipc9oAoB	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
980.	c2h4cohco	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
981.	c6e5oAoB	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
982.	c6e5oyAoB	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
983.	Bc5oAoC	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
984.	Ac7oD	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
985.	Ac7oBoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
986.	Ec7e6oAoB	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
987.	chxoAoC	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
988.	chxoAoD	G	0	112.13456	300	5000	6	8	2	0	0
989.	BchxoAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
990.	DchxoAoC	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
991.	c6oAoBoyF	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
992.	Ec5oAoB	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
993.	Fc6e1oCoE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
994.	DchxoqB	G	0	129.14193	300	5000	6	9	3	0	0
995.	chxoqBqjD	G	0	161.14073	300	5000	6	9	5	0	0
996.	chxoAoBojD	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
997.	chxoAoBqD	G	0	144.13336	300	5000	6	8	4	0	0
998.	Fc6oAoDoE	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
999.	Fc6oAoCoD	G	0	127.12599	300	5000	6	7	3	0	0
1000.	FpchqDqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1001.	pche5qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1002.	pche5ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1003.	c9e1qAoF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1004.	c9e1ojAoF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1005.	Dc5oBohE	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1006.	c5oBqjDohE	G	0	133.12933	300	5000	5	9	4	0	0
1007.	c4oAoC	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
1008.	c4oyAoC	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1009.	Fc9e1qDqF	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1010.	Iic9e1qDqI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1011.	c9e1oFqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1012.	c9e1oFojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1013.	EtDc7e1oIqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1014.	EtDc7e1oIojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1015.	c7e1oD	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1016.	Cc7e1oD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1017.	Ipche4e6	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1018.	Dpche5e7	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1019.	Ipche5e7	G	0	121.21161	300	3000	9	13	0	0	0
1020.	BchxoAoD	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1021.	chxe2oAoD	G	0	110.11862	300	5000	6	6	2	0	0
1022.	Echxe2oAoD	G	0	109.11065	300	5000	6	5	2	0	0
1023.	c6e1oCoyF	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1024.	c6e2e5oyAoD	G	0	109.11065	300	5000	6	5	2	0	0
1025.	Ic9oAoD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1026.	Gc7oAoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1027.	Ic9oBoD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1028.	Gc7oBoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1029.	Ac5oBoD	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1030.	MeDc6oBoGrF	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1031.	Bc5oAoD	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1032.	MeEc8e1oIqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1033.	MeEc8e1oIojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1034.	MeEc6e1oGrF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1035.	Fc9e1qEqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1036.	c9e1e5qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1037.	c9e1e5ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1038.	c7e1e6qC	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1039.	c7e1e6ojC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1040.	Cc7h11-16	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1041.	c9e5oAqH	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1042.	c9e5oAojH	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1043.	HpchqBqE	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1044.	pche4qB	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1045.	pche4ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1046.	mche1qC	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1047.	mche1ojC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1048.	MeBc4e1oErD	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1049.	ch2ccho	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
1050.	pche5qB	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1051.	pche5ojB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1052.	Amche3	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1053.	Gc7e1e3	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1054.	Fc9e1qAqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1055.	c7e1e6qA	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1056.	Bc7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1057.	Ic9oCoD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1058.	Gc7oCoD	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1059.	Ac5oBoC	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1060.	MeDc6oCoGrF	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1061.	MeEc8e1oIqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1062.	MeEc8e1oIojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1063.	Bc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1064.	chxe1qC	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1065.	chxe1ojC	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1066.	chchhco	G	0	55.05931	300	5000	3	3	1	0	0
1067.	c9e5oAqG	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1068.	c9e5oAojG	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1069.	c7e2oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1070.	c7e2oyAoG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1071.	c7e2oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1072.	c7e1oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1073.	c7e1oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1074.	Fc6e1oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1075.	Dc4e1oA	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1076.	Fc9e1qEqG	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1077.	c9e1e6qE	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1078.	c9e1e6ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1079.	c9e1e5qG	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1080.	c9e1e5ojG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1081.	c7e2e6oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1082.	c7e2e6oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1083.	c5e2oA	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1084.	c5e2oyA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1085.	EtDc7e1qEqHrI	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1086.	EtDc7e1e8qE	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1087.	EtDc7e1e8ojE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1088.	MeCc6oAoDrG	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1089.	pche3qF	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1090.	pche3ojF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1091.	MeEc8e5oArI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1092.	EtDc7e4oIrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1093.	MeEc7e6e8oA	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1094.	MeEc7e6e8oyA	G	0	123.18307	300	5000	8	11	1	0	0
1095.	MeCc6e3oArG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1096.	MeCc6e1e7rF	G	0	95.17167	300	5000	7	11	0	0	0
1097.	MeCc5e4e5oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1098.	MeCc5e4e5oyA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
1099.	MeEc8e8oAqF	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1100.	MeEc8e8oAojF	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1101.	Ec6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1102.	MeBc6e7oAoF	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1103.	MeBc6e7oAoyF	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1104.	MeBc6e7oyAoF	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1105.	MeBc5e6oArE	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1106.	ic3h4hco	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1107.	EtDc7e1oIqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1108.	EtDc7e1oIojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1109.	MeCc6e5oAoG	G	0	126.16250	300	5000	7	10	2	0	0
1110.	MeCc6e5oyAoG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1111.	MeCc6e5oAoyG	G	0	125.15453	300	5000	7	9	2	0	0
1112.	MeBc5e4oArF	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1113.	Cc6e5oA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1114.	Dc7oAoC	G	0	127.17047	300	5000	7	11	2	0	0
1115.	c3h7chco	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1116.	EtDc7e9oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1117.	EtDc7e9oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1118.	c9e5oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1119.	c9e5oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1120.	MeCc6e1oG	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1121.	MeCc6e1oyG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1122.	c7e3oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1123.	chxoAqC	G	0	130.14990	300	5000	6	10	3	0	0
1124.	chxoAojC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1125.	Fc6oAoC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1126.	Fc6oAoE	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1127.	AmchqBqD	G	0	161.18521	300	5000	7	13	4	0	0
1128.	mche1qD	G	0	128.17844	300	5000	7	12	2	0	0
1129.	mche1ojD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1130.	MeEc6e5oArG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1131.	MeCc6e7oArF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1132.	MeCc4e3oArE	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1133.	pche6qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1134.	pche6ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1135.	Ac9e2oF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1136.	Ac9e3oF	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1137.	Ac7e1oD	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1138.	Ic9e3oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1139.	Gc7e3oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1140.	Ic9e4oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1141.	MeDc8e9oArH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1142.	MeDc6e7oArF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1143.	Dc5e4oA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1144.	EtDc7e9oArG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1145.	Gc7e4oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1146.	Ec5e4oA	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1147.	MeDc6e5oArG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1148.	Dc9e8oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1149.	EtDc7e6oArI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1150.	Dc7e6oA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1151.	Gc7e1oE	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1152.	Ic9e3oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1153.	Gc7e3oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1154.	MeDc8e9oBrH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1155.	MeDc6e7oBrF	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1156.	Dc5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1157.	Ic9e4oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1158.	EtDc7e9oBrG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1159.	Gc7e4oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1160.	Ec5e4oB	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1161.	MeDc6e5oBrG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1162.	Dc9e8oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1163.	EtDc7e6oBrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1164.	Dc7e6oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1165.	MeDc8e7oBrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1166.	MeDc8e9oCrH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1167.	MeCc6e7oDrA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1168.	Bc5e1oC	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1169.	eche1oD	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1170.	c9e6oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1171.	Ic9e3oE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1172.	Hc8h15-3	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1173.	Ac7e4oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1174.	Ic9e4oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1175.	EtDc7e9oCrH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1176.	Gc7e4oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1177.	Ac5e1oC	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1178.	MeCc6e1oDrG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1179.	Ac9e6oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1180.	Gc7h13-3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1181.	Ac9e6oD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1182.	Ac7e4oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1183.	EtDc7e6oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1184.	Dc9e8oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1185.	Dc7e1oE	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1186.	eche1oF	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1187.	Ac9e6oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1188.	MeDc8e7oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1189.	MeEc8e9oDrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1190.	MeCc6e7oBrA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1191.	mche1oD	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1192.	MeEc8e9oCrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1193.	MeEc8e9oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1194.	MeCc6e7oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1195.	MeBc5e1rF	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
1196.	MeDc7e8rA	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1197.	mche1oE	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1198.	MeEc8e9oBrH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0

1199.	Ac9e5oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1200.	MeEc6e5oBrG	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1201.	Ac9e5oD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1202.	Ac7e3oB	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1203.	EtDc7e1oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1204.	Dc7e1oC	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1205.	EtDc7e9oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1206.	EtCc6e1rH	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1207.	MeEc8e1oDrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1208.	MeEc8e1oyI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1209.	c6e1e5oC	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1210.	Ec8h15-1	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1211.	Ac9e5oB	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1212.	EtDc7e9oBrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1213.	MeCc6e1rG	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1214.	EtDc7e1oHrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1215.	Fc9e1oE	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1216.	c7e1e6oC	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1217.	c9e5oyA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1218.	EtDc7e9oCrA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1219.	Ac8h15-4	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1220.	EtBc5e7oyA	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1221.	Fc9e1oC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1222.	MeEc8e1oCrI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1223.	EtDc7e1oyI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1224.	MeDc7e1rH	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
1225.	Fc9e1oD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1226.	c7e1e6oD	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1227.	ch2cco	G	0	54.05134	300	5000	3	2	1	0	0
1228.	EtDc7e3oIrG	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1229.	Etall	G	0	68.12376	300	5000	5	8	0	0	0
1230.	EpchqDqB	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1231.	Fc6e1e4	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
1232.	mche1qDqF	G	0	160.17724	300	5000	7	12	4	0	0
1233.	mche1qDojF	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1234.	MeEc8e9oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1235.	MeEc6e5oAqCrG	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1236.	Dc4oAqC	G	0	103.10199	300	5000	4	7	3	0	0
1237.	MeCc6e7oAqErF	G	0	143.16987	300	5000	7	11	3	0	0
1238.	MeCc6e5e7oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1239.	MeCc6e5e7oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1240.	MeBc5e1e4rF	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
1241.	MeEc8e9oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1242.	MeCc6e7oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1243.	Ic9e3qFqH	G	0	189.24109	300	5000	9	17	4	0	0
1244.	c9e1e6qD	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1245.	c9e1e6ojD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1246.	c6e3oA	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1247.	c6e3oyA	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1248.	BchxqAqC	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1249.	c9e6oAqE	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1250.	c9e6oAojE	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1251.	MeEc8e1oIqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1252.	MeEc8e1oIojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1253.	pche5qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1254.	pche5ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1255.	EtDc7e1oIrC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1256.	pche4qH	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1257.	pche4ojH	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1258.	MeEc8e9oArD	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1259.	c9e6oAqD	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1260.	c9e6oAojD	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1261.	BchxqAqD	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1262.	chxe1qD	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1263.	chxe1ojD	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1264.	ac3h4hco1	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1265.	pche6qI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1266.	pche6ojI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1267.	MeEc8e1oIrC	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1268.	pche5qI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1269.	pche5ojI	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1270.	Fc9e4oA	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1271.	c7e4e6oA	G	0	110.16310	300	5000	7	10	1	0	0
1272.	c7e4e6oyA	G	0	109.15513	300	5000	7	9	1	0	0
1273.	Ec6h9-13	G	0	81.14373	300	5000	6	9	0	0	0
1274.	AchxqBqD	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
1275.	c9e6oAqC	G	0	172.23372	300	5000	9	16	3	0	0
1276.	c9e6oAojC	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1277.	c7e4oA	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1278.	chxe1qjC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1279.	Echxe1qC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1280.	chxe1qCqjE	G	0	145.14133	300	5000	6	9	4	0	0
1281.	chxe1oCqE	G	0	128.13396	300	5000	6	8	3	0	0
1282.	chxe1oCojE	G	0	111.12659	300	5000	6	7	2	0	0
1283.	c6e2e5oA	G	0	96.13516	300	5000	6	8	1	0	0
1284.	c6e2e5oyA	G	0	95.12719	300	5000	6	7	1	0	0
1285.	c8h15hco	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
1286.	c8h15co	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
1287.	c9oAoF	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1288.	MeEc8oAoI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1289.	MeEc8oyAoI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1290.	MeEc8oAoyI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1291.	EtDc7oAoI	G	0	156.23432	300	5000	9	16	2	0	0
1292.	EtDc7oyAoI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1293.	EtDc7oAoyI	G	0	155.22635	300	5000	9	15	2	0	0
1294.	c9e8oD	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
1295.	Hc8oD	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1296.	MeDc7oHrA	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1297.	Ec8oA	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1298.	EtCc6oArH	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1299.	MeDc7oArH	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
1300.	VINacrol	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
1301.	c5oAoE	G	0	100.12256	300	5000	5	8	2	0	0
1302.	c5oyAoE	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1303.	eche1	G	0	110.20758	300	5000	8	14	0	0	0
1304.	P2c4h614	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1305.	ech	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
1306.	ch2ch2ch2hco	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1307.	Ac5oB	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1308.	P2c4h513	G	0	96.17964	300	3000	7	12	0	0	0
1309.	eche1e3	G	0	108.19164	300	5000	8	12	0	0	0
1310.	c2h3coc2h4	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1311.	AechoE	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1312.	AechoB	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
1313.	etvinket	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1314.	eche1oE	G	0	124.19104	300	5000	8	12	1	0	0
1315.	bmepral	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1316.	bme1bu	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
1317.	bme2bu	G	0	70.13970	300	5000	5	10	0	0	0
1318.	bddm2pe	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
1319.	dddm1pe	G	0	98.19558	300	3000	7	14	0	0	0
1320.	dddm2pe	G	0	98.19558	300	5000	7	14	0	0	0
1321.	bddmpe2	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1322.	bbdtmpe1	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1323.	bddm3pe2	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1324.	bddm1pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1325.	bmepryl	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1326.	bme2b1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1327.	cme2b1	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1328.	nec5h11	G	0	71.14767	300	5000	5	11	0	0	0
1329.	dddmpe2	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1330.	bbdtmpe3	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1331.	dddm2pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1332.	bddtmpe2	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1333.	bddtmpe1	G	0	113.23149	300	5000	8	17	0	0	0
1334.	bddm1pe3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1335.	bddm2pe3	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1336.	dddm2pe2	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1337.	dm2my1pe	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1338.	dddm1pe3	G	0	97.18761	300	5000	7	13	0	0	0
1339.	bddm2pe1	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1340.	dddm1pe2	G	0	97.18761	300	3000	7	13	0	0	0
1341.	oc7h14	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1342.	bme2pe4	G	0	83.15967	300	5000	6	11	0	0	0
1343.	bddm1pe	G	0	98.19558	300	3000	7	14	0	0	0
1344.	metacrol	G	0	70.09522	300	3000	4	6	1	0	0
1345.	c3h5co	G	0	69.08725	300	5000	4	5	1	0	0
1346.	c4h8o	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1347.	c4h7o	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1348.	ic8h18	G	0	114.23946	298	5000	8	18	0	0	0
1349.	i2c8h16	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
1350.	i1c8h16	G	0	112.22352	300	5000	8	16	0	0	0
1351.	ic8h15	G	0	111.21555	200	5000	8	15	0	0	0
1352.	pc7h15	G	0	99.20355	300	5000	7	15	0	0	0
1353.	ch2ch2ch2oh	G	0	59.09119	300	5000	3	7	1	0	0
1354.	hoc2h4hco	G	0	74.08262	300	5000	3	6	2	0	0
1355.	hoc2h4co	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
1356.	c2h3ch2oh	G	0	58.08322	300	5000	3	6	1	0	0
1357.	c2h3choh	G	0	57.07525	300	5000	3	5	1	0	0
1358.	hoch2hco	G	0	60.05468	300	5000	2	4	2	0	0
1359.	hoch2co	G	0	59.04671	300	5000	2	3	2	0	0
1360.	c4h5hco	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
1361.	c4h5co	G	0	81.09925	300	5000	5	5	1	0	0
1362.	hxol	G	0	102.18298	300	5000	6	14	1	0	0
1363.	hxol1j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1364.	hxol2j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1365.	hxol3j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1366.	hxol4j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1367.	hxol5j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1368.	hxol6j	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1369.	hxol2e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1370.	hxol3e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1371.	hxol4e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1372.	hxol5e	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1373.	hxol4e6j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1374.	hxol3e5j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1375.	hxol2e4j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1376.	hxol5e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1377.	hxol4e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1378.	hxol3e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1379.	hxol2e1j	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
1380.	c5h9hco-1	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1381.	c5h9hco-2	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1382.	c5h9hco-3	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1383.	c5h9co-1	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1384.	c5h9co-2	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1385.	c5h9co-3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1386.	Ec5h9-2	G	0	69.13173	300	5000	5	9	0	0	0
1387.	pe1ol5j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1388.	pe1ol4j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1389.	pe1ol3j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1390.	pe1ol2j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1391.	pe1ol1j	G	0	87.14707	300	5000	5	11	1	0	0
1392.	pe1ol4e	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1393.	pe1jol4e	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1394.	pe1ol2e4e	G	0	84.12316	300	5000	5	8	1	0	0
1395.	pe1jol2e4e	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1396.	pe1ol3e5j	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1397.	b1ol	G	0	74.12710	300	5000	4	10	1	0	0
1398.	c4h9o	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1399.	b1ol1j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1400.	b1ol2j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1401.	b1ol3j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1402.	b1ol4j	G	0	73.11913	300	5000	4	9	1	0	0
1403.	b1*o4ol	G	0	88.11056	300	5000	4	8	2	0	0
1404.	b1j*o4ol	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
1405.	b1ol2e4j	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1406.	b1ol3e	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1407.	b1jol3e	G	0	71.10319	300	5000	4	7	1	0	0
1408.	hxol1o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1409.	hxol2o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1410.	hxol3o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1411.	hxol4o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1412.	hxol5o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1413.	hxol6o2	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1414.	hxol1o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1415.	hxol2o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1416.	hxol3o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1417.	hxol4o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1418.	hxol5o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1419.	hxol6o2h	G	0	134.18178	300	5000	6	14	3	0	0
1420.	hxol1o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1421.	hxol2o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1422.	hxol3o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1423.	hxol4o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1424.	hxol5o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1425.	hxol6o	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1426.	hxol2j1o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1427.	hxol3j1o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1428.	hxol4j1o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1429.	hxol1j2o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1430.	hxol3j2o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1431.	hxol4j2o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1432.	hxol5j2o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1433.	hxol1j3o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1434.	hxol2j3o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1435.	hxol4j3o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1436.	hxol5j3o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1437.	hxol6j3o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1438.	hxol1j4o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1439.	hxol2j4o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1440.	hxol3j4o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1441.	hxol5j4o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1442.	hxol6j4o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0

1443. hxol2j5o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1444. hxol3j5o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1445. hxol4j5o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1446. hxol6j5o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1447. hxol3j6o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1448. hxol4j6o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1449. hxol5j6o2h	G	0	133.17381	300	5000	6	13	3	0	0
1450. hxolcy2o1	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1451. hxolcy3o1	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1452. hxolcy4o1	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1453. hxolcy3o2	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1454. hxolcy4o2	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1455. hxolcy5o2	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1456. hxolcy4o3	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1457. hxolcy5o3	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1458. hxolcy6o3	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1459. hxolcy5o4	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1460. hxolcy6o4	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1461. hxolcy6o5	G	0	116.16644	300	5000	6	12	2	0	0
1462. hxol1o2h2o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1463. hxol1o2h3o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1464. hxol1o2h4o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1465. hxol2o2h1o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1466. hxol2o2h3o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1467. hxol2o2h4o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1468. hxol2o2h5o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1469. hxol3o2h1o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1470. hxol3o2h2o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1471. hxol3o2h4o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1472. hxol3o2h5o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1473. hxol3o2h6o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1474. hxol4o2h1o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1475. hxol4o2h2o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1476. hxol4o2h3o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1477. hxol4o2h5o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1478. hxol4o2h6o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1479. hxol5o2h2o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1480. hxol5o2h3o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1481. hxol5o2h4o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1482. hxol5o2h6o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1483. hxol6o2h3o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1484. hxol6o2h4o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1485. hxol6o2h5o2	G	0	165.17261	300	5000	6	13	5	0	0
1486. hxol1*o2o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1487. hxol1*o3o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1488. hxol1*o4o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1489. hxol2*o1o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1490. hxol2*o3o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1491. hxol2*o4o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1492. hxol2*o5o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1493. hxol3*o1o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1494. hxol3*o2o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1495. hxol3*o4o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1496. hxol3*o5o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1497. hxol3*o6o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1498. hxol4*o1o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1499. hxol4*o2o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1500. hxol4*o3o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1501. hxol4*o5o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1502. hxol4*o6o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1503. hxol5*o2o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1504. hxol5*o3o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1505. hxol5*o4o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1506. hxol5*o6o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1507. hxol6*o3o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1508. hxol6*o4o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1509. hxol6*o5o2h	G	0	148.16524	300	5000	6	12	4	0	0
1510. hxol2*o1j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1511. hxol3*o1j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1512. hxol4*o1j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1513. hxol3*o2j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1514. hxol4*o2j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1515. hxol5*o2j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1516. hxol2*o3j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1517. hxol4*o3j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1518. hxol5*o3j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1519. hxol6*o3j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1520. hxol2*o4j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1521. hxol3*o4j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1522. hxol5*o4j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1523. hxol6*o4j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1524. hxol2*o5j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1525. hxol3*o5j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1526. hxol4*o5j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1527. hxol6*o5j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1528. hxol3*o6j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1529. hxol4*o6j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1530. hxol5*o6j	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1531. c5h10cooh-1	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1532. c5h10cooh-2	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1533. c5h10cooh-3	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
1534. ch2cooh	G	0	59.04671	300	5000	2	3	2	0	0
1535. ch2ch2cooh	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
1536. c2h3cooh	G	0	72.06668	300	5000	3	4	2	0	0
1537. hoch2coch2	G	0	73.07465	300	5000	3	5	2	0	0
1538. c2h3coch2oh	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
1539. c2h3cochoh	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
1540. c3h7coc2h3	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1541. c3h6coc2h3-1	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1542. c3h6coc2h3-2	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1543. c3h6coc2h3-3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1544. c2h5coc3h5-1	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1545. c2h5coc3h4	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1546. ch3coc4h7-1	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
1547. Cc6e5oB	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1548. Dc6e5oB	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
1549. b1ol2*o4j	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
1550. b1ol3*o4j	G	0	87.10259	300	5000	4	7	2	0	0
1551. pe1ol3*o5j	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1552. pe1ol4*o5j	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1553. pe1*o5ol	G	0	102.13850	300	5000	5	10	2	0	0
1554. pe1j*o5ol	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1555. pe1ol3*o4e	G	0	100.12256	300	5000	5	8	2	0	0
1556. pe1ol3*o4e2j	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1557. pe1jol3*o4e	G	0	99.11459	300	5000	5	7	2	0	0
1558. c2h3coch2hco	G	0	98.10662	300	5000	5	6	2	0	0
1559. c2h3coch2co	G	0	97.09865	300	5000	5	5	2	0	0
1560. c2h3cohco	G	0	84.07868	300	5000	4	4	2	0	0
1561. c2h3coco	G	0	83.07071	300	5000	4	3	2	0	0
1562. c4h9cohco	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1563. c4h9coco	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1564. c3h7coch2hco	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1565. c3h7coch2co	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1566. c2h5coc2h4hco	G	0	114.15050	300	5000	6	10	2	0	0
1567. c2h5coc2h4co	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
1568. nc3h7o2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1569. nc3h7o2h	G	0	76.09856	300	5000	3	8	2	0	0
1570. ic3h7o2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1571. ic3h7o2h	G	0	76.09856	300	5000	3	8	2	0	0
1572. c3h6ooh1-2	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1573. c3h6ooh1-3	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1574. c3h6ooh2-1	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1575. c3h6ooh1-1	G	0	75.09059	300	5000	3	7	2	0	0
1576. c3h6ooh1-2o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1577. c3h6ooh1-3o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1578. c3h6ooh2-1o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1579. c3h6ooh1-1o2	G	0	107.08939	300	5000	3	7	4	0	0
1580. c3ket12	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1581. c3ket13	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1582. c3ket21	G	0	90.08202	300	5000	3	6	3	0	0
1583. c4h9qjA	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1584. c4h9qjB	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1585. c4h8rAqA	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1586. c4h8rBqA	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1587. c4h8rCqA	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1588. c4h8rDqA	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1589. c4h8rAqB	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1590. c4h8rCqB	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1591. c4h8rDqB	G	0	89.11853	300	5000	4	9	2	0	0
1592. c4h8qjAqA	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1593. c4h8qjBqA	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1594. c4h8qjCqA	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1595. c4h8qjDqA	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1596. c4h8qjAqB	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1597. c4h8qjCqB	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1598. c4h8qjDqB	G	0	121.11733	300	5000	4	9	4	0	0
1599. c4h8o#3	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1600. c4h8o#4	G	0	72.11116	300	5000	4	8	1	0	0
1601. c4h8o#5	G	0	72.11116	200	5000	4	8	1	0	0
1602. c4h7oAqB	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1603. c4h7oAqC	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1604. c4h7oAqD	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1605. c4h7oBqA	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1606. c4h7oBqC	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1607. c4h7oBqD	G	0	104.10996	300	5000	4	8	3	0	0
1608. nc4h9o2h	G	0	90.12650	300	5000	4	10	2	0	0
1609. c4h7o2h	G	0	88.11056	300	5000	4	8	2	0	0
1610. c5h11qjA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1611. c5h11qjB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1612. c5h11qjC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1613. c5h10rAqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1614. c5h10rBqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1615. c5h10rCqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1616. c5h10rDqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1617. c5h10rEqA	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1618. c5h10rAqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1619. c5h10rBqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1620. c5h10rCqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1621. c5h10rDqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1622. c5h10rEqB	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1623. c5h10rAqC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1624. c5h10rBqC	G	0	103.14647	300	5000	5	11	2	0	0
1625. c5h10qjAqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1626. c5h10qjBqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1627. c5h10qjCqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1628. c5h10qjDqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1629. c5h10qjEqA	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1630. c5h10qjAqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1631. c5h10qjBqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1632. c5h10qjCqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1633. c5h10qjDqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1634. c5h10qjEqB	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1635. c5h10qjAqC	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1636. c5h10qjBqC	G	0	135.14527	300	5000	5	11	4	0	0
1637. c5h9oAqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1638. c5h9oAqB	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1639. c5h9oAqC	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1640. c5h9oAqD	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1641. c5h9oAqE	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1642. c5h9oBqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1643. c5h9oBqC	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1644. c5h9oBqD	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1645. c5h9oBqE	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1646. c5h9oCqA	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1647. c5h9oCqB	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1648. c5h10o-AB	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1649. c5h10o-BC	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1650. c5h10o-AC	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1651. c5h10o-BD	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1652. c5h10o-AD	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1653. c5h10o-AE	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1654. nc5h11o2h	G	0	104.15444	300	5000	5	12	2	0	0
1655. nc3h7coch2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1656. nc3h7coch2o2	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
1657. nc3h7coch2o2h	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1658. nc3h7coch2o	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1659. c3h6coch3-1	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1660. c3h6coch3-2	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1661. c3h6coch3-3	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1662. c2h5coc2h5	G	0	86.13910	300	5000	5	10	1	0	0
1663. c2h5coc2h4p	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1664. c2h5coc2h4o2	G	0	117.12993	300	5000	5	9	3	0	0
1665. c2h5coc2h4o2h	G	0	118.13790	300	5000	5	10	3	0	0
1666. c2h5coc2h4o	G	0	101.13053	300	5000	5	9	2	0	0
1667. c2h5coc2h4s	G	0	85.13113	300	5000	5	9	1	0	0
1668. pc2h4coc2h3	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1669. sc2h4coc2h3	G	0	83.11519	300	5000	5	7	1	0	0
1670. divinket	G	0	82.10722	300	5000	5	6	1	0	0
1671. c6h13qjA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1672. c6h13qjB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1673. c6h13qjC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1674. c6h13qA	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1675. c6h13qB	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1676. c6h13qC	G	0	118.18238	300	5000	6	14	2	0	0
1677. c6h13ojA	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1678. c6h13ojB	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1679. c6h13ojC	G	0	101.17501	300	5000	6	13	1	0	0
1680. c6h12rBqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1681. c6h12rCqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1682. c6h12rDqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1683. c6h12rEqA	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1684. c6h12rAqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1685. c6h12rCqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1686. c6h12rDqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0

1687. c6h12rEqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1688. c6h12rFqB	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1689. c6h12rAqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1690. c6h12rBqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1691. c6h12rDqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1692. c6h12rEqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1693. c6h12rFqC	G	0	117.17441	300	5000	6	13	2	0	0
1694. c6h12qjBqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1695. c6h12qjCqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1696. c6h12qjDqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1697. c6h12qjEqA	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1698. c6h12qjAqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1699. c6h12qjCqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1700. c6h12qjDqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1701. c6h12qjEqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1702. c6h12qjFqB	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1703. c6h12qjAqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1704. c6h12qjBqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1705. c6h12qjDqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1706. c6h12qjEqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1707. c6h12qjFqC	G	0	149.17321	300	5000	6	13	4	0	0
1708. c6h11oAqB	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1709. c6h11oAqC	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1710. c6h11oAqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1711. c6h11oAqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1712. c6h11oBqA	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1713. c6h11oBqC	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1714. c6h11oBqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1715. c6h11oBqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1716. c6h11oBqF	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1717. c6h11oCqA	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1718. c6h11oCqB	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1719. c6h11oCqD	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1720. c6h11oCqE	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1721. c6h11oCqF	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
1722. c6h12o-AB	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1723. c6h12o-BC	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1724. c6h12o-CD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1725. c6h12o-AC	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1726. c6h12o-BD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1727. c6h12o-AD	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1728. c6h12o-BE	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1729. c6h12o-AE	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1730. hexanone	G	0	100.16704	300	5000	6	12	1	0	0
1731. c7h15qjA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1732. c7h15qjB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1733. c7h15qjC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1734. c7h15qjD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1735. c7h14rBqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1736. c7h14rCqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1737. c7h14rDqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1738. c7h14rEqA	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1739. c7h14rAqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1740. c7h14rCqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1741. c7h14rDqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1742. c7h14rEqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1743. c7h14rFqB	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1744. c7h14rAqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1745. c7h14rBqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1746. c7h14rDqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1747. c7h14rEqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1748. c7h14rFqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1749. c7h14rGqC	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1750. c7h14rAqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1751. c7h14rBqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1752. c7h14rCqD	G	0	131.20235	300	5000	7	15	2	0	0
1753. c7h14qjBqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1754. c7h14qjCqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1755. c7h14qjDqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1756. c7h14qjEqA	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1757. c7h14qjAqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1758. c7h14qjCqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1759. c7h14qjDqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1760. c7h14qjEqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1761. c7h14qjFqB	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1762. c7h14qjAqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1763. c7h14qjBqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1764. c7h14qjDqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1765. c7h14qjEqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1766. c7h14qjFqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1767. c7h14qjGqC	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1768. c7h14qjAqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1769. c7h14qjBqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1770. c7h14qjCqD	G	0	163.20115	300	5000	7	15	4	0	0
1771. c7h14o-AB	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1772. c7h14o-BC	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1773. c7h14o-CD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1774. c7h14o-AC	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1775. c7h14o-BD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1776. c7h14o-CE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1777. c7h14o-AD	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1778. c7h14o-BE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1779. c7h14o-AE	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1780. c7h14o-BF	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1781. c7h15qA	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1782. c7h15qB	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1783. c7h15qC	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1784. c7h15qD	G	0	132.21032	300	5000	7	16	2	0	0
1785. c7h15ojA	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1786. c7h15ojB	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1787. c7h15ojC	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1788. c7h15ojD	G	0	115.20295	300	5000	7	15	1	0	0
1789. c7h13oAqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1790. c7h13oAqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1791. c7h13oAqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1792. c7h13oAqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1793. c7h13oBqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1794. c7h13oBqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1795. c7h13oBqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1796. c7h13oBqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1797. c7h13oBqF	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1798. c7h13oCqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1799. c7h13oCqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1800. c7h13oCqD	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1801. c7h13oCqE	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1802. c7h13oCqF	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1803. c7h13oCqG	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1804. c7h13oDqA	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1805. c7h13oDqB	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1806. c7h13oDqC	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
1807. heptanone	G	0	114.19498	300	5000	7	14	1	0	0
1808. c6h11hco	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
1809. c6h11co	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
1810. c8h17qjA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1811. c8h17qjB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1812. c8h17qjC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1813. c8h17qjD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1814. c8h16rBqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1815. c8h16rCqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1816. c8h16rDqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1817. c8h16rEqA	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1818. c8h16rAqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1819. c8h16rCqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1820. c8h16rDqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1821. c8h16rEqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1822. c8h16rFqB	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1823. c8h16rAqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1824. c8h16rBqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1825. c8h16rDqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1826. c8h16rEqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1827. c8h16rFqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1828. c8h16rGqC	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1829. c8h16rAqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1830. c8h16rBqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1831. c8h16rCqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1832. c8h16rEqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1833. c8h16rFqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1834. c8h16rGqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1835. c8h16rHqD	G	0	145.23029	300	5000	8	17	2	0	0
1836. c8h16qjBqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1837. c8h16qjCqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1838. c8h16qjDqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1839. c8h16qjEqA	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1840. c8h16qjAqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1841. c8h16qjCqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1842. c8h16qjDqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1843. c8h16qjEqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1844. c8h16qjFqB	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1845. c8h16qjAqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1846. c8h16qjBqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1847. c8h16qjDqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1848. c8h16qjEqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1849. c8h16qjFqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1850. c8h16qjGqC	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1851. c8h16qjAqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1852. c8h16qjBqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1853. c8h16qjCqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1854. c8h16qjEqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1855. c8h16qjFqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1856. c8h16qjGqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1857. c8h16qjHqD	G	0	177.22909	300	5000	8	17	4	0	0
1858. c8h16o-AB	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1859. c8h16o-BC	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1860. c8h16o-CD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1861. c8h16o-DE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1862. c8h16o-AC	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1863. c8h16o-BD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1864. c8h16o-CE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1865. c8h16o-AD	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1866. c8h16o-BE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1867. c8h16o-CF	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1868. c8h16o-AE	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1869. c8h16o-BF	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1870. c8h17qA	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1871. c8h17qB	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1872. c8h17qC	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1873. c8h17qD	G	0	146.23826	300	5000	8	18	2	0	0
1874. c8h17ojA	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1875. c8h17ojB	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1876. c8h17ojC	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1877. c8h17ojD	G	0	129.23089	300	5000	8	17	1	0	0
1878. c8h15oAqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1879. c8h15oAqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1880. c8h15oAqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1881. c8h15oAqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1882. c8h15oBqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1883. c8h15oBqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1884. c8h15oBqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1885. c8h15oBqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1886. c8h15oBqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1887. c8h15oCqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1888. c8h15oCqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1889. c8h15oCqD	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1890. c8h15oCqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1891. c8h15oCqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1892. c8h15oCqG	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1893. c8h15oDqA	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1894. c8h15oDqB	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1895. c8h15oDqC	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1896. c8h15oDqE	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1897. c8h15oDqF	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1898. c8h15oDqG	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1899. c8h15oDqH	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
1900. octanone	G	0	128.22292	300	5000	8	16	1	0	0
1901. c9h19qjA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1902. c9h19qjB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1903. c9h19qjC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1904. c9h19qjD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1905. c9h19qjE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1906. c9h18rBqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1907. c9h18rCqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1908. c9h18rDqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1909. c9h18rEqA	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1910. c9h18rAqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1911. c9h18rCqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1912. c9h18rDqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1913. c9h18rEqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1914. c9h18rFqB	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1915. c9h18rAqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1916. c9h18rBqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1917. c9h18rDqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1918. c9h18rEqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1919. c9h18rFqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1920. c9h18rGqC	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1921. c9h18rAqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1922. c9h18rBqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1923. c9h18rCqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1924. c9h18rEqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1925. c9h18rFqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1926. c9h18rGqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1927. c9h18rHqD	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1928. c9h18rAqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1929. c9h18rBqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1930. c9h18rCqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0

1931. c9h18rDqE	G	0	159.25823	300	5000	9	19	2	0	0
1932. c9h18qjBqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1933. c9h18qjCqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1934. c9h18qjDqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1935. c9h18qjEqA	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1936. c9h18qjAqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1937. c9h18qjCqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1938. c9h18qjDqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1939. c9h18qjEqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1940. c9h18qjFqB	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1941. c9h18qjAqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1942. c9h18qjBqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1943. c9h18qjDqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1944. c9h18qjEqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1945. c9h18qjFqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1946. c9h18qjGqC	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1947. c9h18qjAqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1948. c9h18qjBqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1949. c9h18qjCqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1950. c9h18qjEqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1951. c9h18qjFqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1952. c9h18qjGqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1953. c9h18qjHqD	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1954. c9h18qjAqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1955. c9h18qjBqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1956. c9h18qjCqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1957. c9h18qjDqE	G	0	191.25703	300	5000	9	19	4	0	0
1958. c9h17oAqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1959. c9h17oAqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1960. c9h17oAqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1961. c9h17oAqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1962. c9h17oBqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1963. c9h17oBqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1964. c9h17oBqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1965. c9h17oBqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1966. c9h17oBqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1967. c9h17oCqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1968. c9h17oCqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1969. c9h17oCqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1970. c9h17oCqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1971. c9h17oCqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1972. c9h17oCqG	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1973. c9h17oDqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1974. c9h17oDqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1975. c9h17oDqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1976. c9h17oDqE	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1977. c9h17oDqF	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1978. c9h17oDqG	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1979. c9h17oDqH	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1980. c9h17oEqA	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1981. c9h17oEqB	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1982. c9h17oEqC	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1983. c9h17oEqD	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
1984. c9h18o-AB	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1985. c9h18o-BC	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1986. c9h18o-CD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1987. c9h18o-DE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1988. c9h18o-AC	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1989. c9h18o-BD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1990. c9h18o-CE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1991. c9h18o-DF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0

1992. c9h18o-AD	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1993. c9h18o-BE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1994. c9h18o-CF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1995. c9h18o-AE	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1996. c9h18o-BF	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1997. c9h18o-CG	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
1998. c9h19qA	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
1999. c9h19qB	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
2000. c9h19qC	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
2001. c9h19qD	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
2002. c9h19qE	G	0	160.26620	300	5000	9	20	2	0	0
2003. c9h19ojA	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
2004. c9h19ojB	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
2005. c9h19ojC	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
2006. c9h19ojD	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
2007. c9h19ojE	G	0	143.25883	300	5000	9	19	1	0	0
2008. nonanone	G	0	142.25086	300	5000	9	18	1	0	0
2009. c10h21qjA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2010. c10h21qjB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2011. c10h21qjC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2012. c10h21qjD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2013. c10h21qjE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2014. c10h21qA	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
2015. c10h21qB	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
2016. c10h21qC	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
2017. c10h21qD	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
2018. c10h21qE	G	0	174.29414	300	5000	10	22	2	0	0
2019. c10h21ojA	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
2020. c10h21ojB	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
2021. c10h21ojC	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
2022. c10h21ojD	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
2023. c10h21ojE	G	0	157.28677	300	5000	10	21	1	0	0
2024. c10h20rBqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2025. c10h20rCqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2026. c10h20rDqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2027. c10h20rEqA	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2028. c10h20rAqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2029. c10h20rCqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2030. c10h20rDqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2031. c10h20rEqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2032. c10h20rFqB	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2033. c10h20rAqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2034. c10h20rBqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2035. c10h20rDqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2036. c10h20rEqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2037. c10h20rFqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2038. c10h20rGqC	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2039. c10h20rAqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2040. c10h20rBqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2041. c10h20rCqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2042. c10h20rEqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2043. c10h20rFqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2044. c10h20rGqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2045. c10h20rHqD	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2046. c10h20rAqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2047. c10h20rBqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2048. c10h20rCqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2049. c10h20rDqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2050. c10h20rFqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2051. c10h20rGqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2052. c10h20rHqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0

2053. c10h20rIqE	G	0	173.28617	300	5000	10	21	2	0	0
2054. c10h20qjBqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2055. c10h20qjCqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2056. c10h20qjDqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2057. c10h20qjEqA	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2058. c10h20qjAqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2059. c10h20qjCqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2060. c10h20qjDqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2061. c10h20qjEqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2062. c10h20qjFqB	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2063. c10h20qjAqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2064. c10h20qjBqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2065. c10h20qjDqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2066. c10h20qjEqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2067. c10h20qjFqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2068. c10h20qjGqC	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2069. c10h20qjAqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2070. c10h20qjBqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2071. c10h20qjCqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2072. c10h20qjEqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2073. c10h20qjFqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2074. c10h20qjGqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2075. c10h20qjHqD	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2076. c10h20qjAqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2077. c10h20qjBqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2078. c10h20qjCqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2079. c10h20qjDqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2080. c10h20qjFqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2081. c10h20qjGqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2082. c10h20qjHqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2083. c10h20qjIqE	G	0	205.28497	300	5000	10	21	4	0	0
2084. c10h19oAqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2085. c10h19oAqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2086. c10h19oAqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2087. c10h19oAqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2088. c10h19oBqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2089. c10h19oBqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2090. c10h19oBqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2091. c10h19oBqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2092. c10h19oBqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2093. c10h19oCqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2094. c10h19oCqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2095. c10h19oCqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2096. c10h19oCqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2097. c10h19oCqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2098. c10h19oCqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2099. c10h19oDqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2100. c10h19oDqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2101. c10h19oDqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2102. c10h19oDqE	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2103. c10h19oDqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2104. c10h19oDqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2105. c10h19oDqH	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2106. c10h19oEqA	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2107. c10h19oEqB	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2108. c10h19oEqC	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2109. c10h19oEqD	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2110. c10h19oEqF	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2111. c10h19oEqG	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2112. c10h19oEqH	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0
2113. c10h19oEqI	G	0	188.27760	300	5000	10	20	3	0	0

2114. c10h20o-AB	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2115. c10h20o-BC	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2116. c10h20o-CD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2117. c10h20o-DE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2118. c10h20o-EF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2119. c10h20o-AC	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2120. c10h20o-BD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2121. c10h20o-CE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2122. c10h20o-DF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2123. c10h20o-AD	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2124. c10h20o-BE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2125. c10h20o-CF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2126. c10h20o-DG	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2127. c10h20o-AE	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2128. c10h20o-BF	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2129. c10h20o-CG	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2130. Fc10h19oB	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2131. Gc10h19oC	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2132. c9h19hco	G	0	156.27880	300	5000	10	20	1	0	0
2133. c9h19co	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2134. choch2ch2cho	G	0	86.09462	300	5000	4	6	2	0	0
2135. choch2ch2co	G	0	85.08665	300	5000	4	5	2	0	0
2136. nc4h9coch2	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2137. nc4h9coch2o2	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
2138. nc4h9coch2o2h	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
2139. nc4h9coch2o	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2140. nc5h11coch2	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2141. nc5h11coch2o2	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
2142. nc5h11coch2o2h	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
2143. nc5h11coch2o	G	0	129.18641	300	5000	7	13	2	0	0
2144. nc6h13coch2	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
2145. nc6h13coch2o2	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
2146. nc6h13coch2o2h	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2147. nc6h13coch2o	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0
2148. nc7h15coch2	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
2149. nc7h15coch2o2	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
2150. nc7h15coch2o2h	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
2151. nc7h15coch2o	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
2152. nc3h7coc2h4p	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2153. nc3h7coc2h4o2	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
2154. nc3h7coc2h4o2h	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
2155. nc3h7coc2h4o	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2156. nc4h9coc2h4p	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2157. nc4h9coc2h4o2	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
2158. nc4h9coc2h4o2h	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
2159. nc4h9coc2h4o	G	0	129.18641	300	5000	7	13	2	0	0
2160. nc5h11coc2h4p	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
2161. nc5h11coc2h4o2	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
2162. nc5h11coc2h4o2h	G	0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0
2163. nc5h11coc2h4o	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0
2164. nc6h13coc2h4p	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
2165. nc6h13coc2h4o2	G	0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
2166. nc6h13coc2h4o2h	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
2167. nc6h13coc2h4o	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
2168. nc5h11coc3h6-1	G	0	141.24289	300	5000	9	17	1	0	0
2169. nc5h11coc3h6o2-1G		0	173.24169	300	5000	9	17	3	0	0
2170. npecoc3h6o2h-1	G	0	174.24966	300	5000	9	18	3	0	0
2171. nc5h11coc3h6o-1	G	0	157.24229	300	5000	9	17	2	0	0
2172. nc4h9coc3h6-1	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
2173. nc4h9coc3h6o2-1	G	0	159.21375	300	5000	8	15	3	0	0
2174. nc4h9coc3h6o2h-1G		0	160.22172	300	5000	8	16	3	0	0

2175.	nc4h9coc3h6o-1	G	0	143.21435	300	5000	8	15	2	0	0
2176.	nc3h7coc3h6-1	G	0	113.18701	300	5000	7	13	1	0	0
2177.	nc3h7coc3h6o2-1	G	0	145.18581	300	5000	7	13	3	0	0
2178.	nc3h7coc3h6o2h-1	G	0	146.19378	300	5000	7	14	3	0	0
2179.	nc3h7coc3h6o-1	G	0	129.18641	300	5000	7	13	2	0	0
2180.	c2h5coc3h6-1	G	0	99.15907	300	5000	6	11	1	0	0
2181.	c2h5coc3h6o2-1	G	0	131.15787	300	5000	6	11	3	0	0
2182.	c2h5coc3h6o2h-1	G	0	132.16584	300	5000	6	12	3	0	0
2183.	c2h5coc3h6o-1	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2184.	ch3coc5h9-1	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
2185.	ch2coc5h9-1	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
2186.	ch3coc5h8-13	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
2187.	ch3coc5h8-15	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
2188.	c2h5coc5h9-1	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
2189.	sc2h4coc5h9-1	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2190.	c2h5coc5h8-13	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2191.	c2h5coc5h8-15	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2192.	c2h3coc3h7	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
2193.	c2h3coc3h6-3	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
2194.	c2h3coc3h6-2	G	0	97.14313	300	5000	6	9	1	0	0
2195.	c2h3coc4h9	G	0	112.17904	300	5000	7	12	1	0	0
2196.	c2h3coc4h8-4	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
2197.	c2h3coc4h8-3	G	0	111.17107	300	5000	7	11	1	0	0
2198.	c2h3coc5h11	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
2199.	c2h3coc5h10-5	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2200.	c2h3coc5h10-4	G	0	125.19901	300	5000	8	13	1	0	0
2201.	c2h3coc6h13	G	0	140.23492	300	5000	9	16	1	0	0
2202.	c2h3coc6h12-6	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
2203.	c2h3coc6h12-5	G	0	139.22695	300	5000	9	15	1	0	0
2204.	chxqjA	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2205.	chxqArC	G	0	115.15847	300	5000	6	11	2	0	0
2206.	chxo-AC	G	0	98.15110	300	5000	6	10	1	0	0
2207.	chxqAqjC	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
2208.	chxqAqCrE	G	0	147.15727	300	5000	6	11	4	0	0
2209.	c6e5oAqC	G	0	130.14990	300	5000	6	10	3	0	0
2210.	c6e5oAojC	G	0	113.14253	300	5000	6	9	2	0	0
2211.	echoA	G	0	126.20698	300	5000	8	14	1	0	0
2212.	echA	G	0	111.21555	300	5000	8	15	0	0	0
2213.	c10h21hco	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2214.	c10h21co	G	0	169.29877	300	5000	11	21	1	0	0
2215.	c11h22-5	G	0	154.30734	300	5000	11	22	0	0	0
2216.	nc11h24	G	0	156.32328	300	5000	11	24	0	0	0
2217.	c11h22-1	G	0	154.30734	300	5000	11	22	0	0	0
2218.	c11h22-2	G	0	154.30734	300	5000	11	22	0	0	0
2219.	c11h22-3	G	0	154.30734	300	5000	11	22	0	0	0
2220.	c11h22-4	G	0	154.30734	300	5000	11	22	0	0	0
2221.	Ac11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2222.	Bc11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2223.	Cc11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2224.	Dc11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2225.	Ec11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2226.	Fc11h23	G	0	155.31531	300	5000	11	23	0	0	0
2227.	c11h22o-EG	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2228.	c9h16-13	G	0	124.23552	300	5000	9	16	0	0	0
2229.	c11h23qA	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2230.	c11h23qB	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2231.	c11h23qC	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2232.	c11h23qD	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2233.	c11h23qE	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2234.	c11h23qjA	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2235.	c11h23qjB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2236.	c11h23qjC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2237.	c11h23qjD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2238.	c11h23qjE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2239.	c11h23ojA	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2240.	c11h23ojB	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2241.	c11h23ojC	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2242.	c11h23ojD	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2243.	c11h23ojE	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2244.	c11h23qF	G	0	188.32208	300	5000	11	24	2	0	0
2245.	c11h23qjF	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2246.	c11h23ojF	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2247.	c11h20-13	G	0	152.29140	300	5000	11	20	0	0	0
2248.	c10h18-13	G	0	138.26346	300	5000	10	18	0	0	0
2249.	c11h22rBqA	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2250.	c11h22rCqA	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2251.	c11h22rDqA	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2252.	c11h22rEqA	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2253.	c11h22rAqB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2254.	c11h22rCqB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2255.	c11h22rDqB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2256.	c11h22rEqB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2257.	c11h22rFqB	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2258.	c11h22rAqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2259.	c11h22rBqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2260.	c11h22rDqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2261.	c11h22rEqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2262.	c11h22rFqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2263.	c11h22rGqC	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2264.	c11h22rAqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2265.	c11h22rBqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2266.	c11h22rCqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2267.	c11h22rEqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2268.	c11h22rFqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2269.	c11h22rGqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2270.	c11h22rHqD	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2271.	c11h22rAqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2272.	c11h22rBqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2273.	c11h22rCqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2274.	c11h22rDqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2275.	c11h22rFqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2276.	c11h22rGqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2277.	c11h22rHqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2278.	c11h22rIqE	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2279.	c11h22rBqF	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2280.	c11h22rCqF	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2281.	c11h22rDqF	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2282.	c11h22rEqF	G	0	187.31411	300	5000	11	23	2	0	0
2283.	c11h21oAqB	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2284.	c11h21oAqC	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2285.	c11h21oAqD	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2286.	c11h21oAqE	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2287.	c11h21oBqA	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2288.	c11h21oBqD	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2289.	c11h21oBqE	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2290.	c11h21oBqF	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2291.	c11h21oCqA	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2292.	c11h21oCqB	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2293.	c11h21oBqC	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2294.	c11h21oCqD	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2295.	c11h21oCqE	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2296.	c11h21oCqF	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2297.	c11h21oCqG	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2298.	c11h21oDqA	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2299.	c11h21oDqB	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2300.	c11h21oDqC	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2301.	c11h21oDqE	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2302.	c11h21oDqF	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2303.	c11h21oDqG	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2304.	c11h21oEqA	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2305.	c11h21oEqB	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2306.	c11h21oEqC	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2307.	c11h21oEqD	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2308.	c11h21oEqF	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2309.	c11h21oEqG	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2310.	c11h21oEqH	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2311.	c11h21oEqI	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2312.	c11h21oFqB	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2313.	c11h21oFqC	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2314.	c11h21oFqD	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2315.	c11h21oFqE	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2316.	c11h21oDqH	G	0	202.30554	300	5000	11	22	3	0	0
2317.	c11h22qjBqA	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2318.	c11h22qjCqA	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2319.	c11h22qjDqA	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2320.	c11h22qjEqA	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2321.	c11h22qjAqB	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2322.	c11h22qjDqB	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2323.	c11h22qjEqB	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2324.	c11h22qjFqB	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2325.	c11h22qjAqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2326.	c11h22qjBqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2327.	c11h22qjEqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2328.	c11h22qjFqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2329.	c11h22qjGqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2330.	c11h22qjAqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2331.	c11h22qjBqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2332.	c11h22qjEqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2333.	c11h22qjFqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2334.	c11h22qjGqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2335.	c11h22qjHqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2336.	c11h22qjAqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2337.	c11h22qjCqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2338.	c11h22qjDqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2339.	c11h22qjFqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2340.	c11h22qjGqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2341.	c11h22qjHqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2342.	c11h22qjBqF	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2343.	c11h22qjCqF	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2344.	c11h22qjDqF	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2345.	c11h22qjEqF	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2346.	c11h22qjCqB	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2347.	c11h22qjDqC	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2348.	c11h22qjCqD	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2349.	c11h22qjBqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2350.	c11h22qjIqE	G	0	219.31291	300	5000	11	23	4	0	0
2351.	c8h14-13	G	0	110.20758	300	5000	8	14	0	0	0
2352.	c11h22o-AB	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2353.	c11h22o-AC	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2354.	c11h22o-AD	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2355.	c11h22o-AE	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2356.	c11h22o-BC	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2357.	c11h22o-BE	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2358.	c11h22o-BF	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2359.	c11h22o-CD	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2360.	c11h22o-CE	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2361.	c11h22o-CF	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2362.	c11h22o-DE	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2363.	c11h22o-DF	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2364.	c11h22o-DG	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2365.	c11h22o-DH	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2366.	c11h22o-EF	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2367.	c11h22o-BD	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2368.	c11h22o-CG	G	0	170.30674	300	5000	11	22	1	0	0
2369.	Cc11h21-1	G	0	153.29937	300	5000	11	21	0	0	0
2370.	Dc11h21-2	G	0	153.29937	300	5000	11	21	0	0	0
2371.	Ec11h21-3	G	0	153.29937	300	5000	11	21	0	0	0
2372.	Fc11h21-4	G	0	153.29937	300	5000	11	21	0	0	0
2373.	Gc11h21-5	G	0	153.29937	300	5000	11	21	0	0	0
2374.	c11h22rBohA	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2375.	c11h22rCohB	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2376.	c11h22rDohC	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2377.	c11h22rEohD	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2378.	c11h22rFohE	G	0	171.31471	300	5000	11	23	1	0	0
2379.	c11h22qjBohA	G	0	203.31351	300	5000	11	23	3	0	0
2380.	c11h22qjCohB	G	0	203.31351	300	5000	11	23	3	0	0
2381.	c11h22qjDohC	G	0	203.31351	300	5000	11	23	3	0	0
2382.	c11h22qjEohD	G	0	203.31351	300	5000	11	23	3	0	0
2383.	c11h22qjFohE	G	0	203.31351	300	5000	11	23	3	0	0
2384.	nc12h26	G	0	170.35122	300	5000	12	26	0	0	0
2385.	Fc12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2386.	c12h25qjF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2387.	c12h25qjA	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2388.	c12h25qjB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2389.	c12h25qjC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2390.	c12h25qjD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2391.	c12h25qA	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2392.	c12h25qB	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2393.	c12h25qD	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2394.	c12h25qjE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2395.	Ac12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2396.	Bc12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2397.	Cc12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2398.	Dc12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2399.	Ec12h25	G	0	169.34325	300	5000	12	25	0	0	0
2400.	c12h24-1	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2401.	c12h24-2	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2402.	c12h24-3	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2403.	c12h24-4	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2404.	c12h24-5	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2405.	Cc12h23-1	G	0	167.32731	300	5000	12	23	0	0	0
2406.	Dc12h23-2	G	0	167.32731	300	5000	12	23	0	0	0
2407.	Ec12h23-3	G	0	167.32731	300	5000	12	23	0	0	0
2408.	Fc12h23-4	G	0	167.32731	300	5000	12	23	0	0	0
2409.	Gc12h23-5	G	0	167.32731	300	5000	12	23	0	0	0
2410.	c12h24rAqB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2411.	c12h24rBqA	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2412.	c12h24rBqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2413.	c12h24rCqB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2414.	c12h24rCqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2415.	c12h24rDqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2416.	c12h24rDqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2417.	c12h24rEqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2418.	c12h24rEqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0

2419.	c12h24rFqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2420.	c12h24rFqG	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2421.	c12h24rGqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2422.	c12h24rCqA	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2423.	c12h24rDqA	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2424.	c12h24rEqA	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2425.	c12h24rDqB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2426.	c12h24rEqB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2427.	c12h24rFqB	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2428.	c12h24rAqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2429.	c12h24rEqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2430.	c12h24rFqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2431.	c12h24rGqC	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2432.	c12h24rAqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2433.	c12h24rBqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2434.	c12h24rFqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2435.	c12h24rGqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2436.	c12h24rHqD	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2437.	c12h24rAqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2438.	c12h24rBqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2439.	c12h24rCqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2440.	c12h24rGqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2441.	c12h24rHqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2442.	c12h24rIqE	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2443.	c12h24rBqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2444.	c12h24rCqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2445.	c12h24rDqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2446.	c12h24rHqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2447.	c12h24rIqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2448.	c12h24rJqF	G	0	201.34205	300	5000	12	25	2	0	0
2449.	c12h24qjJqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2450.	c12h25qC	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2451.	c12h25qE	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2452.	c12h25qF	G	0	202.35002	300	5000	12	26	2	0	0
2453.	c12h24-6	G	0	168.33528	300	5000	12	24	0	0	0
2454.	c12h24qjFqB	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2455.	c12h24qjAqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2456.	c12h25ojA	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2457.	c12h25ojB	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2458.	c12h25ojC	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2459.	c12h25ojD	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2460.	c12h25ojE	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2461.	c12h25ojF	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2462.	c12h24qjBqA	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2463.	c12h24qjCqA	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2464.	c12h24qjDqA	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2465.	c12h24qjEqA	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2466.	c12h24qjFqA	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2467.	c12h24qjAqB	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2468.	c12h24qjCqB	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2469.	c12h24qjDqB	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2470.	c12h24qjEqB	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2471.	c12h24qjBqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2472.	c12h24qjDqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2473.	c12h24qjEqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2474.	c12h24qjFqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2475.	c12h24qjGqC	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2476.	c12h24qjAqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2477.	c12h24qjBqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2478.	c12h24qjCqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2479.	c12h24qjEqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2480.	c12h24qjFqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2481.	c12h24qjGqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2482.	c12h24qjHqD	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2483.	c12h24qjAqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2484.	c12h24qjBqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2485.	c12h24qjCqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2486.	c12h24qjDqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2487.	c12h24qjFqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2488.	c12h24qjGqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2489.	c12h24qjHqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2490.	c12h24qjIqE	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2491.	c12h24qjAqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2492.	c12h24qjBqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2493.	c12h24qjCqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2494.	c12h24qjDqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2495.	c12h24qjGqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2496.	c12h24qjHqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2497.	c12h24qjIqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2498.	c12h24qjEqF	G	0	233.34085	300	5000	12	25	4	0	0
2499.	c12h24o-AB	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2500.	c12h24o-AC	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2501.	c12h24o-AD	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2502.	c12h24o-AE	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2503.	c12h24o-BC	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2504.	c12h24o-BD	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2505.	c12h24o-BE	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2506.	c12h24o-BF	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2507.	c12h24o-CD	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2508.	c12h24o-CE	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2509.	c12h24o-CF	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2510.	c12h24o-CG	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2511.	c12h24o-DE	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2512.	c12h24o-DF	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2513.	c12h24o-DG	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2514.	c12h24o-DH	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2515.	c12h24o-EF	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2516.	c12h24o-EG	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2517.	c12h24o-EH	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2518.	c12h24o-FG	G	0	184.33468	300	5000	12	24	1	0	0
2519.	c12h23oAqB	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2520.	c12h23oAqC	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2521.	c12h23oAqD	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2522.	c12h23oAqE	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2523.	c12h23oBqA	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2524.	c12h23oBqC	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2525.	c12h23oBqD	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2526.	c12h23oBqE	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2527.	c12h23oBqF	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2528.	c12h23oCqA	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2529.	c12h23oCqB	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2530.	c12h23oCqD	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2531.	c12h23oCqE	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2532.	c12h23oCqF	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2533.	c12h23oCqG	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2534.	c12h23oDqA	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2535.	c12h23oDqB	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2536.	c12h23oDqC	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2537.	c12h23oDqE	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2538.	c12h23oDqF	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2539.	c12h23oDqG	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2540.	c12h23oDqH	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2541.	c12h23oEqA	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2542.	c12h23oEqB	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2543.	c12h23oEqC	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2544.	c12h23oEqD	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2545.	c12h23oEqF	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2546.	c12h23oEqG	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2547.	c12h23oEqH	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2548.	c12h23oEqI	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2549.	c12h23oFqA	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2550.	c12h23oFqB	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2551.	c12h23oFqC	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2552.	c12h23oFqD	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2553.	c12h23oFqG	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2554.	c12h23oFqH	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2555.	c12h23oFqI	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2556.	c12h23oFqJ	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2557.	c12h23oFqE	G	0	216.33348	300	5000	12	24	3	0	0
2558.	c12h24rBohA	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2559.	c12h24rCohB	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2560.	c12h24rDohC	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2561.	c12h24rEohD	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2562.	c12h24rFohE	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2563.	c12h24rGohF	G	0	185.34265	300	5000	12	25	1	0	0
2564.	c12h24qjBohA	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2565.	c12h24qjCohB	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2566.	c12h24qjDohC	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2567.	c12h24qjEohD	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2568.	c12h24qjFohE	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2569.	c12h24qjGohF	G	0	217.34145	300	5000	12	25	3	0	0
2570.	nc7h15coc3h6-1	G	0	169.29877	300	5000	11	21	1	0	0
2571.	nc6h13coc3h6-1	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2572.	nc8h17coch2	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2573.	nc7h15coc2h4p	G	0	155.27083	300	5000	10	19	1	0	0
2574.	nc6h16coch2	G	0	127.21495	300	5000	8	15	1	0	0
2575.	c2h3coc7h15	G	0	154.26286	300	5000	10	18	1	0	0
2576.	nc9h19coch2	G	0	169.29877	300	5000	11	21	1	0	0
2577.	nc8h17coc2h4p	G	0	169.29877	300	5000	11	21	1	0	0
2578.	c2h3coc8h17	G	0	168.29080	300	5000	11	20	1	0	0
2579.	phc4h9	G	0	134.23158	300	5000	10	14	0	0	0
2580.	Aphc4h8	G	0	133.22361	300	5000	10	13	0	0	0
2581.	Bphc4h8	G	0	133.22361	300	5000	10	13	0	0	0
2582.	Cphc4h8	G	0	133.22361	300	5000	10	13	0	0	0
2583.	Dphc4h8	G	0	133.22361	300	5000	10	13	0	0	0
2584.	Dphsecb	G	0	133.22361	300	5000	10	13	0	0	0
2585.	phc4h7-3	G	0	132.21564	300	5000	10	12	0	0	0
2586.	phc4h7-2	G	0	132.21564	300	5000	10	12	0	0	0
2587.	phc4h7-1	G	0	132.21564	300	5000	10	12	0	0	0
2588.	Bphc4h6-3	G	0	131.20767	300	5000	10	11	0	0	0
2589.	Cphc4h6-1	G	0	131.20767	300	5000	10	11	0	0	0
2590.	Dphc4h6-1	G	0	131.20767	300	5000	10	11	0	0	0
2591.	phc4h5	G	0	130.19970	300	5000	10	10	0	0	0
2592.	phc4h8ojA	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2593.	phc4h8ojB	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2594.	phc4h8ojC	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2595.	phc4h8ojD	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2596.	phc4h8qjA	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2597.	phc4h8qjB	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2598.	phc4h8qjC	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2599.	phc4h8qjD	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2600.	bbzqA	G	0	166.23038	300	5000	10	14	2	0	0
2601.	bbzqB	G	0	166.23038	300	5000	10	14	2	0	0
2602.	bbzqC	G	0	166.23038	300	5000	10	14	2	0	0
2603.	bbzqD	G	0	166.23038	300	5000	10	14	2	0	0
2604.	bbzqDrD	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2605.	bbzqDrC	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2606.	bbzqDrB	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2607.	bbzqDrA	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2608.	bbzqCrD	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2609.	bbzqCrC	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2610.	bbzqCrB	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2611.	bbzqCrA	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2612.	bbzqBrD	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2613.	bbzqBrC	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2614.	bbzqBrB	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2615.	bbzqBrA	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2616.	bbzqArD	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2617.	bbzqArC	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2618.	bbzqArB	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2619.	bbzqArA	G	0	165.22241	300	5000	10	13	2	0	0
2620.	bbzqDqjC	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2621.	bbzqDqjB	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2622.	bbzqDqjA	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2623.	bbzqCqjD	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2624.	bbzqCqjB	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2625.	bbzqCqjA	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2626.	bbzqBqjD	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2627.	bbzqBqjC	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2628.	bbzqBqjA	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2629.	bbzqAqjD	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2630.	bbzqAqjC	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2631.	bbzqAqjB	G	0	197.22121	300	5000	10	13	4	0	0
2632.	bbzoCqD	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2633.	bbzoBqD	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2634.	bbzoAqD	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2635.	bbzoDqC	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2636.	bbzoBqC	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2637.	bbzoAqC	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2638.	bbzoDqB	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2639.	bbzoCqB	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2640.	bbzoAqB	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2641.	bbzoDqA	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2642.	bbzoCqA	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2643.	bbzoBqA	G	0	180.21384	300	5000	10	12	3	0	0
2644.	bbzohDrC	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2645.	bbzohCrD	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2646.	bbzohCrB	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2647.	bbzohBrC	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2648.	bbzohArB	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2649.	bbzohBrA	G	0	149.22301	300	5000	10	13	1	0	0
2650.	bbzohDqjC	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2651.	bbzohCqjD	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2652.	bbzohCqjB	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2653.	bbzohBqjC	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2654.	bbzohAqjB	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2655.	bbzohBqjA	G	0	181.22181	300	5000	10	13	3	0	0
2656.	bbze3ojB	G	0	147.20707	300	5000	10	11	1	0	0
2657.	bbze1ojC	G	0	147.20707	300	5000	10	11	1	0	0
2658.	bbze1ojD	G	0	147.20707	300	5000	10	11	1	0	0
2659.	bbzoA	G	0	148.21504	300	5000	10	12	1	0	0
2660.	bbzoB	G	0	148.21504	300	5000	10	12	1	0	0
2661.	bbzoC	G	0	148.21504	300	5000	10	12	1	0	0
2662.	bbzoD	G	0	148.21504	300	5000	10	12	1	0	0

```
2663. phc3h6co        G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2664. phhcco          G  0  118.14322   300   5000   8     6     1     0     0
2665. phc4h7o-AB      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2666. phc4h7o-AC      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2667. phc4h7o-AD      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2668. phc4h7o-BC      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2669. phc4h7o-BD      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2670. phc4h7o-CD      G  0  148.21504   300   5000  10    12     1     0     0
2671. bbzoArB         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2672. bbzoArC         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2673. bbzoArD         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2674. bbzoBrA         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2675. bbzoBrC         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2676. bbzoBrD         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2677. bbzoCrA         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2678. bbzoCrB         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2679. bbzoCrD         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2680. bbzoDrA         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2681. bbzoDrB         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2682. bbzoDrC         G  0  147.20707   300   5000  10    11     1     0     0
2683. hoco            G  0   45.01877   200   6000   1     1     2     0     0
--------------------------------------------------------------------------------


                                                  (k = A T**b exp(-E/RT))
   REACTIONS CONSIDERED                                 A        b        E

    1. c2h3+o2=ch2hco+o                                 1.18E+17   -1.4     5580.0
    2. c2h3+o2=ch2o+hco                                 9.27E+25   -4.0     7043.0
    3. c2h3+o2=chocho+h                                 7.78E+20   -2.9     5541.0
    4. c2h3+o2=c2h2+ho2                                 3.25E+19   -2.3     7932.0
    5. ch3+oh=ch2oh+h                                   1.99E+19   -1.7    11157.0
    6. ch3+oh=ch3o+h                                    9.95E+14   -0.8    16872.0
    7. ch3+oh=sch2+h2o                                  6.37E+18   -1.7    11141.0
    8. ch3+oh=ch2o+h2                                   7.39E+14   -1.1    14551.0
    9. c3h3+c3h3=c6h5+h                                 3.67E+26   -3.9    28960.0
   10. c3h3+c3h3=c6h6                                   3.89E+50  -11.0    20320.0
   11. c3h3+c3h3=fulvene                                1.07E+61  -14.0    28084.0
       Declared duplicate reaction...
   12. c3h3+c3h3=fulvene                                3.20E+28   -5.0     4517.0
       Declared duplicate reaction...
   13. c3h3+c3h3=fulvene                                5.62E+60  -13.9    27093.0
       Declared duplicate reaction...
   14. c3h3+c3h3=fulvene                                7.98E+29   -5.5     4665.0
       Declared duplicate reaction...
   15. fulvene=c6h6                                     2.95E+31   -5.0    88465.0
   16. fulvene=c6h5+h                                   8.51E+24   -2.5   113330.0
   17. nc4h5+c2h2=c6h6+h                                1.69E+16   -1.0     8968.0
   18. nc4h5+c2h2=fulvene+h                             1.74E+19   -1.9    12384.0
   19. ic4h5+c2h2=c6h6+h                                8.25E+24   -3.8    26565.0
   20. ic4h5+c2h2=fulvene+h                             9.74E+26   -3.8    21329.0
   21. h+h+m=h2+m                                       1.00E+18   -1.0        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   22. h+o2=oh+o                                        1.90E+14    0.0    16812.0
   23. h+o2+m=ho2+m                                     8.00E+17   -0.8        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    4.000E-01
   24. h+oh+m=h2o+m                                     3.00E+22   -2.0        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   25. h2+o2=oh+oh                                      1.70E+13    0.0    47780.0
   26. o+h2=oh+h                                        1.30E+04    2.8     5922.0
   27. h2+oh=h2o+h                                      2.16E+08    1.5     3430.0
   28. o+o+m=o2+m                                       1.14E+17   -1.0        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   29. o+h+m=oh+m                                       6.20E+16   -0.6        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   30. h2o+o=oh+oh                                      1.50E+10    1.1    17260.0
   31. oh+oh(+m)=h2o2(+m)                               7.22E+13   -0.4        0.0
     Low pressure limit:  0.22110E+20 -0.76000E+00  0.00000E+00
     TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+09  0.10000E-05
   32. ho2+oh=h2o+o2                                    1.45E+13    0.0     -497.0
   33. ho2+o=oh+o2                                      2.44E+13    0.0     -446.0
   34. h+ho2=h2+o2                                      2.14E+13    0.0     1411.0
   35. h+ho2=oh+oh                                      8.40E+13    0.0      875.0
   36. h+ho2=h2o+o                                      3.01E+13    0.0     1721.0
   37. ho2+ho2=h2o2+o2                                  4.20E+14    0.0    11982.0
       Declared duplicate reaction...
   38. ho2+ho2=h2o2+o2                                  1.30E+11    0.0    -1630.0
       Declared duplicate reaction...
   39. h2o2+oh=ho2+h2o                                  5.80E+14    0.0     9557.0
   40. h2o2+h=ho2+h2                                    1.70E+12    0.0     3750.0
   41. h2o2+h=h2o+oh                                    1.00E+13    0.0     3590.0
   42. h2o2+o=ho2+oh                                    2.80E+13    0.0     6400.0
   43. co+ho2=co2+oh                                    1.15E+05    2.3    17550.0
   44. co+oh=co2+h                                      4.40E+06    1.5     -740.0
   45. co+o+m=co2+m                                     2.83E+13    0.0    -4540.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   46. co+o2=co2+o                                      2.53E+12    0.0    47700.0
   47. hco+m=h+co+m                                     2.30E+17   -1.0    17090.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   48. hco+oh=co+h2o                                    1.00E+14    0.0        0.0
   49. hco+o=co+oh                                      3.00E+13    0.0        0.0
   50. hco+o=co2+h                                      3.00E+13    0.0        0.0
   51. hco+h=co+h2                                      7.22E+13    0.0        0.0
   52. hco+o2=co+ho2                                    7.58E+12    0.0      410.0
   53. hco+ch3=co+ch4                                   1.20E+14    0.0        0.0
   54. hco+ho2=co2+oh+h                                 3.00E+13    0.0        0.0
   55. hco+hco=ch2o+co                                  1.20E+13    0.0        0.0
   56. hco+hco=h2+co+co                                 3.00E+12    0.0        0.0
   57. hco+c2h6=ch2o+c2h5                               4.70E+04    2.7    18235.0
   58. o2cho=hco+o2                                     7.77E+26   -4.0    44230.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  1.20E+11    0.0    -1100.0
   59. ho2cho=ocho+oh                                   5.01E+14    0.0    40150.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  2.32E+06    2.1      655.0
   60. ocho+m=h+co2+m                                   2.44E+15   -0.5    26500.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  7.50E+13    0.0    29000.0
   61. hoch2o=hocho+h                                   1.00E+14    0.0    14900.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  5.92E+11    0.6    12300.0
   62. hocho+m=co+h2o+m                                 2.30E+13    0.0    50000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  1.42E+10    0.5    46840.0
   63. hocho+m=co2+h2+m                                 1.50E+16    0.0    57000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  2.40E+14    0.5    61020.0
   64. hocho=hco+oh                                     4.59E+18   -0.5   108300.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  1.00E+14    0.0        0.0
   65. ch2o+ocho=hco+hocho                              5.60E+12    0.0    13600.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  8.58E+11    0.0    26750.0
   66. ocho+ho2=hocho+o2                                3.50E+10    0.0    -3275.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  3.70E+12   -0.3    52690.0
   67. ocho+h2o2=hocho+ho2                              2.40E+12    0.0    10000.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  1.79E+11    0.4    24790.0
   68. hocho+oh=h2o+co2+h                               2.62E+06    2.1      916.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   69. hocho+oh=h2o+co+oh                               1.85E+07    1.5     -962.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   70. hocho+h=h2+co2+h                                 4.24E+06    2.1     4868.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   71. hocho+h=h2+co+oh                                 6.03E+13   -0.3     2988.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   72. hocho+ch3=ch4+co+oh                              3.90E-07    5.8     2200.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   73. hocho+ho2=h2o2+co+oh                             1.00E+12    0.0    11920.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   74. hocho+o=co+oh+oh                                 1.77E+18   -1.9     2975.0
       Reverse Arrhenius coefficients:                  0.00E+00    0.0        0.0
   75. ch3+ho2=ch4+o2                                   1.00E+12    0.0        0.0
   76. ch4(+m)=ch3+h(+m)                                2.40E+16    0.0   104913.0
     Low pressure limit:  0.45000E+18  0.00000E+00  0.90800E+05
     TROE centering:      0.64000E+00  0.10000E-14  0.31950E+04  0.12126E+05
   77. ch4+oh=ch3+h2o                                   1.60E+06    2.1     2462.0
   78. ch4+o=ch3+oh                                     1.62E+06    2.3     7094.0
   79. ch4+h=ch3+h2                                     2.25E+04    3.0     8756.6
   80. ch4+ch2=ch3+ch3                                  4.30E+12    0.0    10038.0
   81. ch3+m=ch2+h+m                                    1.90E+16    0.0    91600.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   82. ch3+m=ch+h2+m                                    6.90E+14    0.0    82460.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
   83. ch3+ho2=ch3o+oh                                  5.00E+11    0.3     -687.6
   84. ch3+h2o2=ch4+ho2                                 6.10E+09    0.0     -596.0
   85. ch3+o=h+ch2o                                     8.43E+13    0.0        0.0
   86. ch3+o=>h+h2+co                                   3.37E+13    0.0        0.0
   87. ch3+o2=ch2o+oh                                   6.62E+11    0.0    14188.0
   88. ch3+o2=ch3o+o                                    6.60E+13    0.0    31398.0
   89. ch3+ch3=c2h5+h                                   3.01E+13    0.0    13513.0
   90. ch3+ch3(+m)=c2h6(+m)                             9.21E+16   -1.2      635.8
     Low pressure limit:  0.11350E+37 -0.52460E+01  0.17050E+04
     TROE centering:      0.40500E+00  0.11200E+04  0.69600E+02  0.10000E+16
   91. ch3+ch3o=ch4+ch2o                                2.41E+13    0.0        0.0
   92. ch3+ch2oh=ch4+ch2o                               2.41E+12    0.0        0.0
   93. ch3+o2(+m)=ch3o2(+m)                             7.80E+08    1.2        0.0
     Low pressure limit:  0.58000E+26 -0.33000E+01  0.00000E+00
     TROE centering:      0.66400E+00  0.10000E+06  0.10000E+02
   94. ch3+h=ch2+h2                                     7.00E+13    0.0    15100.0
   95. ch3+oh=ch2+h2o                                   3.00E+06    2.0     2500.0
   96. ch2+oh=ch+h2o                                    1.13E+07    2.0     3000.0
   97. ch2+oh=ch2o+h                                    2.50E+13    0.0        0.0
   98. ch2+o=co+h+h                                     5.00E+13    0.0        0.0
   99. ch2+o=co+h2                                      6.00E+13    0.0        0.0
  100. ch2+h=ch+h2                                      3.50E+14    0.0        0.0
  101. ch2+o2=hco+oh                                    4.30E+10    0.0     -500.0
  102. ch2+o2=co2+h2                                    3.45E+11    0.0     1000.0
  103. ch2+o2=co2+h+h                                   1.60E+12    0.0     1000.0
  104. ch2+o2=co+h2o                                    1.87E+10    0.0    -1000.0
  105. ch2+o2=co+oh+h                                   8.64E+10    0.0     -500.0
  106. ch2+o2=ch2o+o                                    5.00E+13    0.0     9000.0
  107. ch2+co2=ch2o+co                                  1.10E+11    0.0     1000.0
  108. ch2+ch2=c2h2+h2                                  3.20E+13    0.0        0.0
  109. ch2+ch2=c2h2+h+h                                 4.00E+13    0.0        0.0
  110. ch2+ch3=c2h4+h                                   4.00E+13    0.0        0.0
  111. ch2+ch=c2h2+h                                    4.00E+13    0.0        0.0
  112. ch2+c2h2=h+c3h3                                  1.20E+13    0.0     6620.0
  113. ch2+c2h4=c3h6                                    4.30E+12    0.0    10038.0
  114. ch2+c2h6=ch3+c2h5                                6.50E+12    0.0     7911.0
  115. sch2+m=ch2+m                                     1.00E+13    0.0        0.0
        h2o             Enhanced by    1.625E+01
        co              Enhanced by    1.875E+00
        co2             Enhanced by    3.750E+00
        ch4             Enhanced by    1.625E+01
        c2h6            Enhanced by    1.625E+01
        h2              Enhanced by    2.500E+00
        ar              Enhanced by    7.500E-01
```

```
116. sch2+o2=co+oh+h                           3.00E+13    0.0        0.0
117. sch2+h2=ch3+h                             7.00E+13    0.0        0.0
118. sch2+h=ch2+h                              2.00E+14    0.0        0.0
119. sch2+h=ch+h2                              3.00E+13    0.0        0.0
120. sch2+o=co+h+h                             1.50E+13    0.0        0.0
121. sch2+o=co+h2                              1.50E+13    0.0        0.0
122. sch2+oh=ch2o+h                            3.00E+13    0.0        0.0
123. sch2+ho2=ch2o+oh                          3.00E+13    0.0        0.0
124. sch2+h2o2=ch3o+oh                         3.00E+13    0.0        0.0
125. sch2+h2o(+m)=ch3oh(+m)                    4.82E+17   -1.2     1145.0
   Low pressure limit:  0.18800E+39 -0.63600E+01  0.50400E+04
   TROE centering:      0.60270E+00  0.20800E+03  0.39220E+04  0.10180E+05
      h2o              Enhanced by    1.625E+01
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
      h2               Enhanced by    2.500E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
126. sch2+ch2o=ch3+hco                         1.20E+12    0.0        0.0
127. sch2+hco=ch3+co                           1.80E+13    0.0        0.0
128. sch2+ch3=c2h4+h                           1.80E+13    0.0        0.0
129. sch2+ch4=ch3+ch3                          4.00E+13    0.0        0.0
130. sch2+c2h6=ch3+c2h5                        1.20E+14    0.0        0.0
131. sch2+c2h4=ac3h5+h                         1.30E+14    0.0        0.0
132. sch2+c2h2=c3h3+h                          1.80E+14    0.0        0.0
133. sch2+h2o=ch2+h2o                          3.00E+13    0.0        0.0
134. sch2+co2=ch2o+co                          3.00E+12    0.0        0.0
135. sch2+ch2co=c2h4+co                        1.60E+14    0.0        0.0
136. ch+oh=hco+h                               3.00E+13    0.0        0.0
137. ch+o=co+h                                 1.80E+14    0.0        0.0
138. ch+o=C+oh                                 1.80E+14    0.0        0.0
139. ch+o2=hco+o                               1.00E+13    0.0        0.0
140. ch+o2=co+oh                               1.00E+13    0.0        0.0
141. ch+co2=hco+co                             3.40E+12    0.0      690.0
142. ch+h2o=ch2o+h                             1.71E+13    0.0     -755.0
143. ch+ch4=c2h4+h                             6.00E+13    0.0        0.0
144. ch+ch3=c2h3+h                             3.00E+13    0.0        0.0
145. ch3+oh(+m)=ch3oh(+m)                      5.65E+13    0.1        0.0
   Low pressure limit:  0.57500E+42 -0.74000E+01  0.62600E+03
   TROE centering:      0.25000E-01  0.10000E-14  0.80000E+04  0.30000E+04
      h2o              Enhanced by    1.600E+01
      co               Enhanced by    2.000E+00
      co2              Enhanced by    3.000E+00
      h2               Enhanced by    2.000E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
146. ch3oh(+m)=ch2oh+h(+m)                     2.69E+16   -0.1    98940.0
   Low pressure limit:  0.23400E+41 -0.63300E+01  0.10310E+06
   TROE centering:      0.77300E+00  0.69300E+03  0.53330E+04  0.10000E-09
147. ch3oh+o2=ch2oh+ho2                        2.05E+13    0.0    44910.0
148. ch3oh+o2=ch3o+ho2                         2.50E+12    0.0    55000.0
149. ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2                      4.82E+10    0.0    12580.0
150. ch3oh+oh=ch2oh+h2o                        1.30E+13    0.0     5960.0
151. ch3oh+oh=ch3o+h2o                         1.30E+13    0.0     5960.0
152. ch3oh+o=ch2oh+oh                          1.63E+13    0.0     5030.0
153. ch3oh+h=ch2oh+h2                          3.20E+13    0.0     6095.0
154. ch3oh+h=h2+ch3o                           8.00E+12    0.0     6095.0
155. ch3oh+h=ch3+h2o                           1.70E+13    0.0     5311.0
156. ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o                      1.55E+12    0.0    79570.0
157. ch3oh+ch3=ch2oh+ch4                       3.57E+11    0.0     8663.0
158. ch3oh+ch3=ch3o+ch4                        4.68E+05    2.3    12764.0
159. ch2oh+m=ch2o+h+m                          1.00E+14    0.0    25100.0
      h2o              Enhanced by    1.000E+00
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
      h2               Enhanced by    2.500E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
160. ch2oh+h=ch2o+h2                           3.00E+13    0.0        0.0
161. ch2oh+o2=ch2o+ho2                         2.17E+14    0.0     4690.0
162. ch2oh+o=ch2o+oh                           4.20E+13    0.0        0.0
163. ch2oh+ho2=ch2o+h2o2                       1.20E+13    0.0        0.0
164. ch2oh+hco=ch3oh+co                        1.00E+13    0.0        0.0
165. ch3o+m=ch2o+h+m                           4.88E+15    0.0    22773.0
      h2o              Enhanced by    1.625E+01
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
      h2               Enhanced by    2.500E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
166. ch3o+ho2=ch2o+h2o2                        3.00E+11    0.0        0.0
167. ch3o+oh=ch2o+h2o                          1.00E+13    0.0        0.0
168. ch3o+o=ch2o+oh                            1.30E+13    0.0        0.0
169. ch3o+h=ch2o+h2                            2.00E+13    0.0        0.0
170. ch3o+o2=ch2o+ho2                          2.35E+10    0.0     1788.0
171. ch3o+ch2o=ch3oh+hco                       1.15E+11    0.0     1280.0
172. ch3o+co=ch3+co2                           1.57E+13    0.0    11804.0
173. ch3o+hco=ch3oh+co                         9.00E+13    0.0        0.0
174. ch3o+c2h5=ch2o+c2h6                       2.41E+13    0.0        0.0
175. ch3o+c2h3=ch2o+c2h4                       2.41E+13    0.0        0.0
176. ch3o+c2h4=ch2o+c2h5                       1.20E+11    0.0     7000.0
177. ch3o2+ho2=ch3o2h+o2                       2.29E+11    0.0    -1790.0
178. ch3o2h+oh=ch3o2+h2o                       1.15E+12    0.0     -380.0
179. ch3o2h+o=oh+ch3o2                         2.00E+13    0.0     4750.0
180. ch3o2h+h=ch3o2+h2                         8.80E+10    0.0     1860.0
181. ch3o2h+h=ch3o+h2o                         8.20E+10    0.0     1860.0
182. ch2o+ch3o2=hco+ch3o2h                     2.00E+12    0.0    11700.0
183. ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h                      1.80E+11    0.0    18500.0
184. ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h                  1.80E+12    0.0    13712.0
185. ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2                     1.80E+10    0.0    -1431.0
186. ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2                 1.05E+09    0.0    -3589.0
187. ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2                  7.74E+10    0.0      -61.0
188. ch3o2+c2h6=ch3o2h+c2h5                    2.95E+11    0.0    15000.0
189. ch3o2+ch3=ch3o+ch3o                       1.00E+12    0.0    -1411.0
190. ch3o2+oh=ch3oh+o2                         6.00E+13    0.0        0.0
191. ch3o2+h=ch3o+oh                           9.60E+13    0.0        0.0
192. ch3o2+h2o2=ch3o2h+ho2                     2.41E+12    0.0     9936.0
193. ch3o2+o=ch3o+o2                           3.60E+13    0.0        0.0
194. ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o                    3.00E+11    0.0        0.0
195. ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h                   1.20E+13    0.0        0.0
196. ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+c2h5o                7.74E+10    0.0      -61.0
197. ch3o2h(+m)=ch3o+oh(+m)                    4.05E+19   -1.2    44255.0
   Low pressure limit:  0.40180E+43 -0.75020E+01  0.46761E+05
   TROE centering:      0.83750E+00  0.36562E+05  0.49880E+03  0.99900E+04
198. ch2o+oh=hco+h2o                           1.72E+09    1.2     -447.0
199. ch2o+ch3=hco+ch4                          7.80E-08    6.1     1970.0
200. ch2o+m=hco+h+m                            5.85E+14    0.0    64200.0
      h2o              Enhanced by    1.625E+01
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
      h2               Enhanced by    2.500E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
201. ch2o+ho2=hco+h2o2                         2.20E+06    2.0    12000.0
202. ch2o+o=hco+oh                             1.81E+13    0.0     3088.0
203. ch2o+h=hco+h2                             1.10E+08    1.8     3000.0
204. ch2o+o2=hco+ho2                           1.23E+06    3.0    52000.0
205. ch2o+o2cho=hco+ho2cho                     1.99E+12    0.0    11660.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          2.33E+02    2.3     4687.0
206. c2h6+ho2=c2h5+h2o2                        8.00E+11    0.0    17600.0
207. c2h6+oh=c2h5+h2o                          5.11E+06    2.1      854.0
208. c2h6+o=c2h5+oh                            9.99E+08    1.5     5803.0
209. c2h6+h=c2h5+h2                            5.25E+14    0.0    12800.0
210. c2h6+o2=c2h5+ho2                          1.00E+13    0.0    51000.0
211. c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh                      3.02E+11    0.0     7000.0
212. c2h6+ch3=c2h5+ch4                         7.54E+00    3.7     9883.0
213. c2h5o2=c2h5+o2                            4.93E+50  -11.5    42250.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.09E+48  -11.5    10220.0
214. c2h5+ho2=c2h5o+oh                         1.90E+12    0.0    -1200.0
215. ch3o2+c2h5=ch3o+c2h5o                     7.00E+12    0.0    -1000.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          6.57E+16   -0.9    31260.0
216. c2h5o2=c2h4o2h                            5.64E+47  -11.4    37320.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          6.99E+48  -12.2    25850.0
217. c2h5+ho2=c2h4+h2o2                        1.79E+12    0.0        0.0
218. c2h5+oh=c2h4+h2o                          2.41E+13    0.0        0.0
219. c2h5+oh=>ch3+ch2o+h                       2.41E+13    0.0        0.0
220. c2h5+o=ch2o+ch3                           4.24E+13    0.0        0.0
221. c2h5+o=ch3hco+h                           5.30E+13    0.0        0.0
222. c2h5+o=c2h4+oh                            3.05E+13    0.0        0.0
223. c2h5+h=c2h4+h2                            1.25E+14    0.0     8000.0
224. c2h5+ch3=c2h4+ch4                         1.14E+12    0.0        0.0
225. c2h5+c2h5=c2h4+c2h6                       1.40E+12    0.0        0.0
226. c2h4+h(+M)=c2h5(+M)                       3.97E+09    1.3     1292.0
   Low pressure limit:  0.27910E+19  0.00000E+00  0.75500E+03
   TROE centering:      0.76000E+00  0.40000E+02  0.10250E+04
227. c2h4+h2=ch3+ch3                           3.77E+12    0.8    84710.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+14    0.0    32000.0
228. c2h4+ho2=c2h4o+oh                         2.23E+12    0.0    17190.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.52E+17   -1.2    39670.0
229. c2h4+M=c2h2+h2+M                          3.00E+17    0.0    79350.0
      h2o              Enhanced by    1.625E+01
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
230. c2h4+M=c2h3+h+M                           2.97E+17    0.0    96560.0
      h2o              Enhanced by    1.625E+01
      co               Enhanced by    1.875E+00
      co2              Enhanced by    3.750E+00
      ch4              Enhanced by    1.625E+01
      c2h6             Enhanced by    1.625E+01
231. c2h4+ho2=c2h4o2h                          4.13E+04    2.2    13490.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.89E+10    0.5    18870.0
232. c2h4+oh=c2h3+h2o                          2.02E+13    0.0     5936.0
233. c2h4+o=ch3+hco                            1.20E+08    1.4      530.0
234. c2h4+o=ch2hco+h                           2.00E+08    1.4      530.0
235. c2h4+h=c2h3+h2                            1.00E+14    0.0    15009.0
236. c2h4+o2=c2h3+ho2                          4.22E+13    0.0    57629.0
237. c2h4+c2h4=c2h5+c2h3                       5.00E+14    0.0    64700.0
238. c2h4+ch3=c2h3+ch4                         6.63E+00    3.7     9499.0
239. c2h4+ho2=c2h3+h2o2                        4.80E+04    2.5    27622.0
240. c2h3+ho2=>ch3+co+oh                       3.00E+13    0.0        0.0
241. c2h3+oh=c2h2+h2o                          3.00E+13    0.0        0.0
242. c2h3+h=c2h2+h2                            3.00E+13    0.0        0.0
243. c2h3+o=ch3+co                             1.50E+13    0.0        0.0
244. c2h3+o=ch2co+h                            1.50E+13    0.0        0.0
245. c2h3+ch=ch2+c2h2                          5.00E+13    0.0        0.0
246. c2h3+ch2=ac3h4+h                          3.00E+13    0.0        0.0
247. c2h3+ch3=c2h2+ch4                         3.91E+11    0.0        0.0
248. c2h3+c2h6=c2h4+c2h5                       1.50E+13    0.0    10000.0
249. c2h3+c2h=c2h2+c2h2                        9.64E+11    0.0        0.0
250. c2h3+c2h2=c4h4+h                          2.00E+12    0.0     5000.0
251. c2h3+hco=c2h4+co                          9.03E+13    0.0        0.0
252. c2h3+ch2o=c2h4+hco                        5.42E+03    2.8     5862.0
253. c2h3+c2h3=c2h2+c2h4                       1.08E+13    0.0        0.0
254. c2h3+c2h3=c4h6                            5.00E+13    0.0        0.0
255. c2h3+c2h4=c4h6+h                          1.27E+12    0.0     7305.0
256. c2h3+ch3=ac3h5+h                          4.73E+02    3.7     5677.0
257. c2h2+oh(+m)=c2h2oh(+m)                    2.29E+13    0.0     1808.0
   Low pressure limit:  0.74400E+27 -0.31000E+01  0.18080E+04
   TROE centering:      0.17000E+00  0.18000E+03  0.50000E+05  0.12772E+05
258. c2h2+o2=hcco+oh                           2.00E+08    1.5    30100.0
259. c2h2+o2=c2h+ho2                           1.21E+13    0.0    74520.0
260. c2h2+ho2=ch2co+oh                         6.09E+09    0.0     7948.0
261. c2h2+oh=c2h+h2o                           3.40E+07    2.0    14000.0
262. c2h2+oh=ch3+co                            4.84E-04    4.0    -2000.0
263. c2h2+oh=ch2co+h                           2.19E-04    4.5    -1000.0
264. c2h2+oh=hccoh+h                           5.06E+05    2.3    13500.0
265. c2h2+o=ch2+co                             1.98E+04    2.6      656.0
266. c2h2+o=hcco+h                             4.62E+04    2.6      656.0
267. c2h2+ch3=c2h+ch4                          1.80E+11    0.0    17290.0
268. c2h2+h(+m)=c2h3(+m)                       2.34E+15   -0.9     3064.0
   Low pressure limit:  0.22540E+41 -0.72690E+01  0.65770E+04
   TROE centering:      0.50000E+00  0.67500E+03  0.67500E+03
      h2o              Enhanced by    5.000E+00
      co               Enhanced by    2.000E+00
      co2              Enhanced by    3.000E+00
      h2               Enhanced by    2.000E+00
      ar               Enhanced by    7.500E-01
269. c2h+h2=c2h2+h                             1.51E+13    0.0     3100.0
270. c2h+oh=hcco+h                             2.00E+13    0.0        0.0
271. c2h+o=co+ch                               1.00E+13    0.0        0.0
272. c2h+o2=co+hco                             2.41E+12    0.0        0.0
273. c2h4o=ch4+co                              1.21E+13    0.0    57200.0
274. c2h4o=ch3hco                              6.00E+13    0.0    57200.0
275. c2h4o=ch3+hco                             4.90E+13    0.0    57200.0
276. c2h4o+o2=c2h3o+ho2                        4.00E+13    0.0    61500.0
277. c2h4o+h=c2h3o+h2                          2.00E+13    0.0     8300.0
278. c2h4o+h=c2h3+h2o                          5.00E+09    0.0     5000.0
279. c2h4o+h=c2h4+oh                           9.51E+10    0.0     5000.0
280. c2h4o+o=c2h3o+oh                          1.91E+12    0.0     5250.0
281. c2h4o+oh=c2h3o+h2o                        4.79E+13    0.0     5955.0
282. c2h4o+ho2=c2h3o+h2o2                      4.00E+12    0.0    17000.0
283. c2h4o+ch3=ch4+c2h3o                       1.07E+12    0.0    11830.0
284. c2h4o2h=c2h4o+oh                          3.16E+11    0.0    19500.0
285. c2h5oh(+M)=ch3+ch2oh(+M)                  5.94E+23   -1.7    91163.0
   Low pressure limit:  0.28800E+86 -0.18900E+02  0.10991E+06
   TROE centering:      0.50000E+00  0.20000E+03  0.89000E+03  0.46000E+04
      h2o              Enhanced by    5.000E+00
      h2               Enhanced by    2.000E+00
      co2              Enhanced by    3.000E+00
```

```
      co                Enhanced by    2.000E+00
286. c2h5oh(+M)=c2h5+oh(+M)                     1.25E+23   -1.5    96005.0
   Low pressure limit:  0.32520E+86 -0.18810E+02  0.11493E+06
   TROE centering:      0.50000E+00  0.30000E+03  0.90000E+03  0.50000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      co2               Enhanced by    3.000E+00
      co                Enhanced by    2.000E+00
287. c2h5oh(+M)=c2h4+h2o(+M)                    2.79E+13    0.1    66136.0
   Low pressure limit:  0.25700E+84 -0.18850E+02  0.86452E+05
   TROE centering:      0.70000E+00  0.35000E+03  0.80000E+03  0.38000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
288. c2h5oh(+M)=ch3hco+h2(+M)                   7.24E+11    0.1    91007.0
   Low pressure limit:  0.44600E+88 -0.19420E+02  0.11559E+06
   TROE centering:      0.90000E+00  0.90000E+03  0.11000E+04  0.35000E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
289. c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2                      2.00E+13    0.0    52800.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           3.47E+08    0.3    -1105.0
290. c2h5oh+o2=ch3choh+ho2                      1.50E+13    0.0    50150.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.08E+09    0.6     -504.0
291. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o                      6.20E+03    2.7     -576.0
292. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o                      1.31E+05    2.4    -1457.0
293. c2h5oh+oh=c2h5o+h2o                        2.81E+02    3.0     -580.0
294. c2h5oh+h=pc2h4oh+h2                        1.88E+03    3.2     7150.0
295. c2h5oh+h=ch3choh+h2                        1.79E+05    2.5     3420.0
296. c2h5oh+h=c2h5o+h2                          5.55E-23   10.6    -4459.0
297. c2h5oh+o=pc2h4oh+oh                        9.69E+02    3.2     4658.0
298. c2h5oh+o=ch3choh+oh                        1.45E+05    2.4      876.0
299. c2h5oh+o=c2h5o+oh                          1.46E-03    4.7     1727.0
300. c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4                     3.30E+02    3.3    12291.0
301. c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4                     1.99E+01    3.4     7635.0
302. c2h5oh+ch3=c2h5o+ch4                       2.04E+00    3.6     7722.0
303. c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2                    8.20E+03    2.5    10750.0
304. c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2                    1.23E+04    2.5    15750.0
305. c2h5oh+ho2=c2h5o+h2o2                      2.50E+12    0.0    24000.0
306. c2h5o+M=ch3hco+h+M                         1.16E+35   -5.9    25274.0
307. c2h5o+M=ch3+ch2o+M                         1.35E+38   -7.0    23800.0
308. c2h5o+o2=ch3hco+ho2                        4.00E+10    0.0     1100.0
309. c2h5o+co=c2h5+co2                          4.68E+02    3.2     5380.0
310. c2h5o+h=ch3+ch2oh                          3.00E+13    0.0        0.0
311. c2h5o+h=c2h4+h2o                           3.00E+13    0.0        0.0
312. c2h5o+oh=ch3hco+h2o                        1.00E+13    0.0        0.0
313. ch3choh+o2=ch3hco+ho2                      1.00E+13    0.0     5564.0
314. ch3choh+ch3=c3h6+h2o                       1.00E+13    0.0        0.0
315. ch3choh+o=ch3hco+oh                        1.00E+14    0.0        0.0
316. ch3choh+h=c2h4+h2o                         3.00E+13    0.0        0.0
317. ch3choh+h=ch3+ch2oh                        3.00E+13    0.0        0.0
318. ch3choh+ho2=ch3hco+oh+oh                   4.00E+13    0.0        0.0
319. ch3choh+oh=ch3hco+h2o                      5.00E+12    0.0        0.0
320. ch3choh+M=ch3hco+h+M                       1.00E+14    0.0    25000.0
321. c2h4+oh=pc2h4oh                            1.29E+12    0.0     -817.0
322. pc2h4oh+o2=o2c2h4oh                        1.00E+12    0.0    -1100.0
323. o2c2h4oh=ch2o+ch2o+oh                      6.00E+10    0.0    24500.0
324. c2h5o2+ch3=c2h5o+ch3o                      8.17E+12    0.0     -906.0
325. c2h5o2=c2h4+ho2                            3.57E+04    2.3    27955.0
326. c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2                      3.40E+11    0.0    -1300.0
327. c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco                    1.99E+12    0.0    11660.0
328. c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h                   2.23E+12    0.0    17190.0
329. ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h                     1.81E+11    0.0    18480.0
330. ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h                 1.81E+12    0.0    13710.0
331. c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h                   1.32E+13    0.0    20470.0
```

```
332. c2h4o+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h                 1.13E+13    0.0    30430.0
333. c3h6+c2h5o2=ac3h5+c2h5o2h                  3.24E+11    0.0    14900.0
334. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7                  1.70E+13    0.0    20460.0
335. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7                  2.00E+12    0.0    17000.0
336. c4h8+c2h5o2=Cc4h7-1+c2h5o2h                1.40E+12    0.0    14900.0
337. c2h5o2+c2h5o2=c2h5o+c2h5o+o2               1.40E+16   -1.6     1860.0
338. c2h5o2h=c2h5o+oh                           4.00E+15    0.0    42900.0
339. c2h5o2h+o=oh+c2h5o2                        2.00E+13    0.0     4750.0
340. c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o                      2.00E+12    0.0     -370.0
341. c2h5o2h+h=ch3hco+oh+h2                     3.20E+13    0.0     7700.0
342. c2h5o2h+ch3=ch3hco+oh+ch4                  5.70E+11    0.0     8700.0
343. c2h5o2h+c2h5=ch3hco+oh+c2h6                3.40E+11    0.0    11400.0
344. c2h5o2h+oh=ch3hco+oh+h2o                   5.90E+12    0.0      900.0
345. c2h5o2h+hco=ch3hco+oh+ch2o                 1.80E+12    0.0    16700.0
346. c2h5o2h+ch3o=ch3hco+oh+ch3oh               6.30E+11    0.0     5500.0
347. c2h5o2h+ho2=ch3hco+oh+h2o2                 8.00E+11    0.0    16200.0
348. ch2hco+o2=ch2co+ho2                        1.58E+10    0.0        0.0
349. ch2hco+o2=ch2o+co+oh                       2.51E+10    0.0        0.0
350. ch2hco+o2=oh+chocho                        2.51E+11    0.0    14640.0
351. ch2hco+o=ch2o+hco                          3.98E+13    0.0        0.0
352. ch2hco+ho2=ch2o+hco+oh                     1.00E+13    0.0        0.0
353. ch2hco+oh=ch2co+h2o                        2.00E+13    0.0        0.0
354. h+ch2co(+m)=ch2hco(+m)                     4.86E+11    0.4    -1755.0
   Low pressure limit:  0.10120E+43 -0.76300E+01  0.38540E+04
   TROE centering:      0.46500E+00  0.20100E+03  0.17730E+04  0.53330E+04
      h2o               Enhanced by    6.000E+00
      co                Enhanced by    1.500E+00
      co2               Enhanced by    2.000E+00
      ch4               Enhanced by    2.000E+00
      c2h5              Enhanced by    3.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
355. ch2hco+h=ch2co+h2                          4.00E+13    0.0        0.0
356. ch2hco+ch3=>c2h5+co+h                      4.90E+14   -0.5        0.0
357. ch2co+m=ch2+co+m                           3.60E+15    0.0    59270.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
      h2                Enhanced by    2.500E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
358. ch2co+o2=ch2o+co2                          2.00E+13    0.0    61500.0
359. ch2co+ho2=>ch2o+co+oh                      6.00E+11    0.0    12738.0
360. ch2co+o=ch2+co2                            1.76E+12    0.0     1349.0
361. ch2co+o=hcco+oh                            1.00E+13    0.0     8000.0
362. ch2co+oh=ch2oh+co                          6.93E+12    0.0        0.0
363. ch2co+oh=hco+ch2o                          2.04E+11    0.0        0.0
364. ch2co+oh=hcco+h2o                          1.02E+11    0.0        0.0
365. ch2co+oh=ch3+co2                           3.10E+12    0.0        0.0
366. ch2co+h=ch3+co                             1.50E+04    2.8      673.0
367. ch2co+h=hcco+h2                            1.80E+14    0.0     8600.0
368. ch2co+ch3=c2h5+co                          6.00E+10    0.0        0.0
369. ch2co+ch3=hcco+ch4                         7.50E+12    0.0    13000.0
370. ch2co+ch2=hcco+ch3                         1.00E+12    0.0        0.0
371. ch2co+ch2=c2h4+co                          3.60E+13    0.0    11000.0
372. ch+ch2o=ch2co+h                            9.46E+13    0.0     -515.0
373. chocho(+m)=ch2o+co(+m)                     4.27E+12    0.0    50600.0
   Low pressure limit:  0.89100E+17  0.00000E+00  0.49200E+05
374. chocho(+m)=co+co+h2(+m)                    1.07E+14    0.0    55100.0
   Low pressure limit:  0.25700E+17  0.00000E+00  0.38400E+05
```

```
375. chocho+oh=choco+h2o                        1.00E+13    0.0        0.0
376. chocho+o=choco+oh                          7.24E+12    0.0     1970.0
377. chocho+h=ch2o+hco                          1.00E+12    0.0        0.0
378. chocho+ho2=choco+h2o2                      1.70E+12    0.0    10700.0
379. chocho+ch3=choco+ch4                       1.74E+12    0.0     8440.0
380. chocho+o2=hco+co+ho2                       6.30E+13    0.0    30000.0
381. choco=hco+co                               2.00E+07    0.0        0.0
382. choco+o2=co+co+ho2                         6.30E+13    0.0    30000.0
383. c2h3o=ch2co+h                              1.60E+13    0.0    35000.0
384. c2h3o=ch3co                                8.51E+14    0.0    14000.0
385. c2h2oh=ch2co+h                             5.00E+15    0.0    28000.0
386. c2h2oh+h=ch2co+h2                          2.00E+13    0.0     4000.0
387. c2h2oh+o=ch2co+oh                          2.00E+13    0.0     4000.0
388. c2h2oh+oh=ch2co+h2o                        1.00E+13    0.0     2000.0
389. c2h2oh+o2=>hco+co2+h2                      4.00E+12    0.0     -250.0
390. hccoh+h=ch2co+h                            1.00E+13    0.0        0.0
391. hcco+m=ch+co+m                             6.00E+15    0.0    58821.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
      h2                Enhanced by    2.500E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
392. hcco+oh=hco+co+h                           1.00E+13    0.0        0.0
393. hcco+o=co+co+h                             1.93E+14    0.0      590.0
394. hcco+h=sch2+co                             1.50E+14    0.0        0.0
395. hcco+o2=co2+co+h                           1.40E+09    1.0        0.0
396. hcco+ch2=c2h+ch2o                          1.00E+13    0.0     2000.0
397. hcco+ch2=c2h3+co                           3.00E+13    0.0        0.0
398. hcco+c2h2=c3h3+co                          1.00E+11    0.0     3000.0
399. hcco+ch=c2h2+co                            5.00E+13    0.0        0.0
400. hcco+hcco=c2h2+co+co                       1.00E+13    0.0        0.0
401. hcco+o=ch+co2                              2.95E+13    0.0     1113.0
402. ch3hco=ch3+hco                             2.45E+16    0.0    84128.0
403. ch3hco+ho2=ch3co+h2o2                      1.70E+12    0.0    10700.0
404. ch3hco+oh=ch3co+h2o                        2.35E+10    0.7    -1113.0
405. ch3hco+o=ch3co+oh                          5.85E+12    0.0     1808.0
406. ch3hco+h=ch3co+h2                          4.10E+09    1.2     2405.0
407. ch3hco+o2=ch3co+ho2                        3.01E+13    0.0    39150.0
408. ch3hco+ch3=ch3co+ch4                       1.70E+12    0.0     8440.0
409. ch3hco+hco=ch3co+ch2o                      7.80E+13    0.0     8440.0
410. ch3o2+ch3hco=ch3o2h+ch3co                  3.01E+12    0.0    11930.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           2.52E+13   -0.5     8991.0
411. ch3hco+ch3co3=ch3co+ch3co3h                3.01E+12    0.0    11930.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.96E+12    0.0    26810.0
412. ch3hco+oh=ch3+hocho                        3.00E+15   -1.1        0.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           5.35E+19   -1.7   119800.0
413. ch3co+m=ch3+co+m                           8.64E+15    0.0    14400.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
      h2                Enhanced by    2.500E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
414. ch3co+o2=ch3co3                            1.20E+11    0.0    -1100.0
415. ch3co3+ho2=ch3co3h+o2                      1.75E+10    0.0    -3275.0
416. ch3co3h=ch3co2+oh                          5.01E+14    0.0    40150.0
417. ch3co2+m=ch3+co2+m                         4.40E+15    0.0    10500.0
418. c2o+o2=co+co+o                             2.00E+13    0.0        0.0
```

```
419. c2o+oh=co+co+h                             2.00E+13    0.0        0.0
420. c2o+o=co+co                                5.00E+13    0.0        0.0
421. c2o+h=ch+co                                5.00E+13    0.0        0.0
422. c2+o2=co+co                                5.00E+13    0.0        0.0
423. c2+oh=c2o+h                                5.00E+13    0.0        0.0
424. c2+h2=c2h+h                                4.00E+05    2.4     1000.0
425. c2h2+ch3=pc3h4+h                           4.78E+03    2.4    12893.0
426. c2h2+ch3=ac3h5                             1.40E+04    2.2    16502.0
427. c2h2+ch3=sc3h5                             3.85E+56  -13.7    27892.0
428. h+c2h5(+m)=c2h6(+m)                        5.21E+17   -1.0     1580.0
   Low pressure limit:  0.19900E+42 -0.70800E+01  0.66850E+04
   TROE centering:      0.84220E+00  0.12500E+03  0.22190E+04  0.68820E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
429. h+c2h(+m)=c2h2(+m)                         1.00E+17   -1.0        0.0
   Low pressure limit:  0.37500E+34 -0.48000E+01  0.19000E+04
   TROE centering:      0.64640E+00  0.13200E+03  0.13150E+04  0.55660E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
430. sc4h9(+m)=c3h6+ch3(+m)                     2.27E+48  -10.5    45869.0
   Low pressure limit:  0.99330E+52 -0.10500E+02  0.34989E+05
   TROE centering:      0.37100E+00  0.10000E-14  0.57400E+03  0.25390E+04
431. c2h3+c2h2(+m)=ic4h5(+m)                    1.00E+04    2.4    17900.0
   Low pressure limit:  0.26000E+39 -0.74100E+01  0.75000E+04
432. ic4h5(+m)=c4h4+h(+m)                       1.00E+14    0.0    50000.0
   Low pressure limit:  0.20000E+16  0.00000E+00  0.42000E+05
433. nc4h5(+m)=c4h4+h(+m)                       1.00E+14    0.0    37000.0
   Low pressure limit:  0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
434. ic4h3(+m)=c4h2+h(+m)                       1.00E+14    0.0    55000.0
   Low pressure limit:  0.25000E+16  0.00000E+00  0.48000E+05
435. nc4h3(+m)=c4h2+h(+m)                       1.00E+14    0.0    36000.0
   Low pressure limit:  0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
436. ch2+c3h8=ch3+ic3h7                         2.19E+12    0.0     6405.0
437. ch2+c3h8=ch3+nc3h7                         1.79E+12    0.0     6405.0
438. ch3+c2h5(+m)=c3h8(+m)                      4.90E+14   -0.5        0.0
   Low pressure limit:  0.68000E+62 -0.13420E+02  0.60000E+04
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.14340E+04  0.53290E+04
439. c3h8+o2=nc3h7+ho2                          4.00E+13    0.0    50872.0
440. c3h8+o2=ic3h7+ho2                          4.00E+13    0.0    47500.0
441. c3h8+ho2=nc3h7+h2o2                        4.76E+04    2.5    16494.0
442. c3h8+ho2=ic3h7+h2o2                        9.64E+03    2.6    13910.0
443. c3h8+oh=nc3h7+h2o                          3.16E+07    1.8      934.0
444. c3h8+oh=ic3h7+h2o                          7.08E+06    1.9     -159.0
445. c3h8+o=nc3h7+oh                            3.72E+06    2.4     5505.0
446. c3h8+o=ic3h7+oh                            5.50E+05    2.5     3140.0
447. c3h8+h=nc3h7+h2                            1.34E+06    2.5     6756.0
448. c3h8+h=ic3h7+h2                            1.01E+04    2.9     2931.0
449. c3h8+ch3=nc3h7+ch4                         3.00E+12    0.0    11710.0
450. c3h8+ch3=ic3h7+ch4                         8.07E+11    0.0    10110.0
451. c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6                       3.16E+11    0.0    12300.0
452. c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6                       5.01E+10    0.0    10400.0
453. c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4                       6.00E+02    3.3    10502.0
454. c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4                       1.00E+03    3.1     8829.0
455. c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8                      1.00E+11    0.0    12900.0
456. c3h8+ac3h5=nc3h7+c3h6                      7.94E+11    0.0    20500.0
```

```
457. c3h8+ac3h5=ic3h7+c3h6                      7.94E+11    0.0    16200.0
458. c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh                      3.18E+11    0.0     7050.0
459. c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh                      7.20E+10    0.0     4470.0
460. c3h8+o2cho=nc3h7+ho2cho                    5.52E+04    2.5    16480.0
461. c3h8+o2cho=ic3h7+ho2cho                    1.48E+04    2.6    13910.0
462. ic3h7=c2h4+ch3                             1.14E+11    0.0    31110.0
463. nc3h7(+m)=c2h4+ch3(+m)                     1.23E+13   -0.1    30202.0
   Low pressure limit:  0.55450E+50 -0.10000E+02  0.35766E+05
   TROE centering:      0.21700E+01  0.10000E-14  0.25100E+03  0.11850E+04
      h2o               Enhanced by    5.000E+00
      co                Enhanced by    2.000E+00
      co2               Enhanced by    3.000E+00
      h2                Enhanced by    2.000E+00
      ar                Enhanced by    7.500E-01
464. c3h6+h(+m)=nc3h7(+m)                       1.33E+13    0.0     3260.7
   Low pressure limit:  0.62600E+39 -0.66600E+01  0.70000E+03
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.13100E+04  0.48097E+05
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
465. c3h6+h(+m)=ic3h7(+m)                       5.70E+09    1.2      874.0
   Low pressure limit:  0.16400E+55 -0.11100E+02  0.93640E+04
   TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E-14  0.26000E+03  0.30000E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
466. nc3h7+o2=c3h6+ho2                          1.00E+12    0.0     5020.0
467. ic3h7+o2=c3h6+ho2                          2.75E+10    0.0    -2151.0
468. oh+ic3h7=nc3h7oh                           5.90E+12    0.0        0.0
469. nc3h7+h=c2h5+ch3                           1.00E+14    0.0        0.0
470. ic3h7+h=c2h5+ch3                           5.00E+13    0.0        0.0
471. ic3h7+h=c3h6+h2                            3.61E+12    0.0        0.0
472. ic3h7+o=aceton+h                           4.82E+13    0.0        0.0
473. ic3h7+o=ch3hco+ch3                         4.82E+13    0.0        0.0
474. nc3h7o=ethco+h                             2.51E+14    0.0    23400.0
475. nc3h7o=c2h5+ch2o                           1.00E+15    0.0    21600.0
476. ic3h7o=aceton+h                            2.00E+14    0.0    21500.0
477. ic3h7o=ch3+ch3hco                          3.98E+14    0.0    17200.0
478. ic3h7o+o2=aceton+ho2                       9.09E+09    0.0      390.0
479. ac3h5+h(+m)=c3h6(+m)                       3.70E+14    0.0        0.0
   Low pressure limit:  0.13300E+61 -0.12000E+02  0.59678E+04
   TROE centering:      0.20000E-01  0.10966E+04  0.10966E+04  0.68595E+04
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
480. c3h6=sc3h5+h                               7.59E+14    0.0   101300.0
481. c3h6=tc3h5+h                               1.45E+15    0.0    98060.0
482. c3h6=c2h3+ch3                              1.10E+21   -1.2    97720.0
483. c3h6=ch4+c2h2                              3.50E+12    0.0    70000.0
484. c3h6+o2=ac3h5+ho2                          1.95E+12    0.0    39000.0
485. c3h6+o2=sc3h5+ho2                          1.40E+13    0.0    60200.0
486. c3h6+o2=tc3h5+ho2                          7.00E+12    0.0    60200.0
487. c3h6+ho2=c3h6o+oh                          1.02E+12    0.0    14964.0
488. c3h6+ho2=ac3h5+h2o2                        1.50E+11    0.0    14190.0
489. c3h6+ho2=sc3h5+h2o2                        7.50E+09    0.0    12570.0
```

```
490. c3h6+ho2=tc3h5+h2o2                        3.00E+09    0.0     9930.0
491. c3h6+oh=ac3h5+h2o                          7.70E+05    2.2      622.0
492. c3h6+oh=sc3h5+h2o                          1.01E+13    0.0     5960.0
493. c3h6+oh=tc3h5+h2o                          1.11E+06    2.0     1450.0
494. c3h6+o=c2h5+hco                            4.69E+07    1.6     -628.0
495. c3h6+o=ch3+ch2hco                          3.90E+07    1.6     -628.0
496. c3h6+o=c2h4+ch2o                           7.02E+07    1.6     -628.0
497. c3h6+o=ac3h5+oh                            1.75E+11    0.7     5884.0
498. c3h6+o=sc3h5+oh                            1.20E+11    0.7     8960.0
499. c3h6+o=tc3h5+oh                            6.00E+10    0.7     7633.0
500. c3h6+h=c2h4+ch3                            7.23E+12    0.0     1302.0
501. c3h6+h=ac3h5+h2                            6.46E+12    0.0     4445.0
502. c3h6+h=sc3h5+h2                            3.46E+14    0.0    17422.0
503. c3h6+h=tc3h5+h2                            1.67E+14    0.0    14818.0
504. c3h6+ch3=ac3h5+ch4                         1.60E+11    0.0     8800.0
505. c3h6+ch3=sc3h5+ch4                         3.30E+11    0.0    10110.0
506. c3h6+ch3=tc3h5+ch4                         5.00E+10    0.0     8030.0
507. c3h6+c2h5=ac3h5+c2h6                       1.00E+11    0.0     9800.0
508. c3h6+c2h3=c4h6+ch3                         7.20E+11    0.0     5008.0
509. c3h6+c2h3=ac3h5+c2h4                       2.21E+00    3.5     4682.0
510. c3h6+c2h3=tc3h5+c2h4                       2.21E+00    3.5     4682.0
511. c3h6+c2h3=sc3h5+c2h4                       2.21E+00    3.5     4682.0
512. c3h6+hco=ac3h5+ch2o                        1.08E+07    1.9    17010.0
513. c3h6+o=>ch2co+ch3+h                        2.50E+07    1.8       76.0
514. c3h6+o=>ch3chco+h+h                        2.50E+07    1.8       76.0
515. c3h6+ch3o2=ac3h5+ch3o2h                    3.24E+11    0.0    14900.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           2.00E+10    0.0    15000.0
516. c3h6+oh=c3h6oh                             9.93E+11    0.0     -960.0
517. c3h6oh+o2=o2c3h6oh                         1.20E+11    0.0    -1100.0
518. o2c3h6oh=ch3hco+ch2o+oh                    1.25E+10    0.0    18900.0
519. ac3h5+ho2=c3h5o+oh                         7.00E+12    0.0    -1000.0
520. ac3h5+ch3o2=c3h5o+ch3o                     7.00E+12    0.0    -1000.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.99E+15   -0.7    17020.0
521. ac3h5+h=ac3h4+h2                           6.03E+12    0.0        0.0
522. ac3h5+ch3=ac3h4+ch4                        1.00E+11    0.0        0.0
523. ac3h5+ch2=c4h6+h                           3.00E+13    0.0        0.0
524. ac3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                      4.00E+11    0.0        0.0
525. ac3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                      1.00E+12    0.0        0.0
526. ac3h5+o=acrol+h                            6.03E+13    0.0        0.0
527. ac3h5+hco=c3h6+co                          6.03E+13    0.0        0.0
528. ac3h5+o2=c2h2+ch2o+oh                      9.71E+20   -2.7    24980.0
529. ac3h5+o2=acrol+oh                          2.47E+13   -0.5    23017.0
530. ac3h5+o2=ac3h4+ho2                         2.18E+21   -2.9    30755.0
531. ac3h5+o2=ch2hco+ch2o                       7.14E+15   -1.2    21046.0
532. sc3h5=pc3h4+h                              5.62E+12    0.0    43500.0
533. sc3h5+o2=ch3hco+hco                        4.34E+12    0.0        0.0
534. sc3h5+ho2=>ch2co+ch3+oh                    4.50E+12    0.0        0.0
535. sc3h5+h=ac3h4+h2                           3.33E+12    0.0        0.0
536. sc3h5+h=pc3h4+h2                           4.00E+13    0.0        0.0
537. sc3h5+o=>ch2co+ch3                         1.81E+14    0.0        0.0
538. sc3h5+ch3=ac3h4+ch4                        1.00E+11    0.0        0.0
539. sc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                      1.00E+11    0.0        0.0
540. sc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                      1.00E+11    0.0        0.0
541. tc3h5=ac3h5                                2.50E+12    0.0    47000.0
542. tc3h5+o2=ch3co+ch2o                        5.01E+12    0.0    19000.0
543. tc3h5+o=>ch2co+ch3                         1.81E+14    0.0        0.0
544. tc3h5+h=pc3h4+h2                           1.00E+13    0.0        0.0
545. tc3h5+ch3=ac3h4+ch4                        1.00E+11    0.0        0.0
546. tc3h5+c2h5=ac3h4+c2h6                      1.00E+11    0.0        0.0
547. tc3h5+c2h3=ac3h4+c2h4                      1.00E+11    0.0        0.0
548. ac3h4+m=c3h3+h+m                           2.00E+18    0.0    80000.0
```

```
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
549. ac3h4=pc3h4                                3.10E+65  -15.1    93814.0
   Declared duplicate reaction...
550. ac3h4=pc3h4                                1.20E+15    0.0    92400.0
   Declared duplicate reaction...
551. ac3h4+o2=c3h3+ho2                          4.00E+13    0.0    61500.0
552. ac3h4+ho2=>c3h4o2h                         3.00E+11    0.0     8000.0
553. ac3h4+ho2=c3h3+h2o2                        1.80E+13    0.0    19000.0
554. ac3h4+ho2=>ch2co+ch2+oh                    5.00E+11    0.0    19000.0
555. ac3h4+ho2=>acrol+oh                        5.00E+11    0.0    19000.0
556. ac3h4+ho2=>c2h2+ch2o+oh                    5.00E+11    0.0    19000.0
557. ac3h4+oh=c3h3+h2o                          3.62E+12    0.0     4170.0
558. ac3h4+oh=ch2co+ch3                         1.00E+12    0.0     -393.0
559. ac3h4+oh=hco+c2h4                          1.25E+11    0.0     -393.0
560. ac3h4+oh=c2h5+co                           1.88E+11    0.0     -393.0
561. ac3h4+oh=acrol+h                           3.75E+11    0.0     -393.0
562. ac3h4+o=c2h4+co                            1.12E-02    4.6    -4243.0
563. ac3h4+o=c2h3+hco                           5.00E-04    4.6    -4243.0
564. ac3h4+o=ch2co+ch2                          1.00E-03    4.6    -4243.0
565. ac3h4+o=c2h2+ch2o                          2.50E-03    4.6    -4243.0
566. ac3h4+h=ac3h5                              1.20E+12    0.0     2700.0
567. ac3h4+h=sc3h5                              8.00E+11    0.0     2000.0
568. ac3h4+h=tc3h5                              8.50E+12    0.0     2000.0
569. ac3h4+h=c3h3+h2                            1.00E+14    0.0    15009.0
570. ac3h4+ch3=c3h3+ch4                         1.33E+12    0.0     7700.0
571. ac3h4+ac3h5=c3h3+c3h6                      9.00E+11    0.0     7700.0
572. c3h4o2h=>ac3h4+ho2                         3.16E+11    0.0    19500.0
573. c3h4o2h=>c3h4o+oh                          3.16E+11    0.0    19500.0
574. c3h4o=>acrol                               2.45E+14    0.0    58485.0
575. c3h4o+o2=>c3h3o+ho2                        4.00E+13    0.0    61500.0
576. c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh                   1.00E+12    0.0    14340.0
577. c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2                      4.00E+12    0.0    17000.0
578. c3h4o+oh=>c3h3o+h2o                        4.79E+13    0.0     5955.0
579. c3h4o+h=>c3h3o+h2                          2.00E+13    0.0     8300.0
580. c3h3o=>c2h3co                              8.51E+14    0.0    14000.0
581. c3h3o+o2=>hcco+hco+oh                      5.01E+12    0.0    19192.0
582. pc3h4+m=c3h3+h+m                           3.39E+22   -2.0    92370.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
583. pc3h4=c2h+ch3                              4.20E+16    0.0   100000.0
584. pc3h4+o2=c3h3+ho2                          2.50E+12    0.0    51000.0
585. pc3h4+o2=>hcco+oh+ch2                      1.00E+07    1.5    30100.0
586. pc3h4+ho2=>c2h4+co+oh                      6.09E+09    0.0     7948.0
587. pc3h4+ho2=ch3co+ch2o                       3.00E+12    0.0    16000.0
588. pc3h4+ho2=ch3hco+hco                       4.50E+12    0.0    16000.0
589. pc3h4+ho2=c3h3+h2o2                        5.00E+11    0.0    19000.0
590. pc3h4+oh=c3h3+h2o                          6.50E+02    3.0      200.0
591. pc3h4+oh=ch2co+ch3                         2.00E-04    4.5    -1000.0
592. pc3h4+oh=hco+c2h4                          1.00E-04    4.5    -1000.0
593. pc3h4+oh=ch2o+c2h3                         1.00E-04    4.5    -1000.0
594. pc3h4+oh=acrol+h                           1.00E-04    4.5    -1000.0
595. pc3h4+o=ch2co+ch2                          6.40E+12    0.0     2100.0
596. pc3h4+o=c2h3+hco                           3.20E+12    0.0     2100.0
597. pc3h4+o=hcco+ch3                           9.18E+12    0.0     2100.0
598. pc3h4+o=ch2o+c2h2                          3.20E+11    0.0     2100.0
599. pc3h4+o=>hcco+ch2+h                        3.20E+11    0.0     2010.0
600. pc3h4+h=tc3h5                              1.30E+13    0.0     1999.0
601. pc3h4+h=c3h3+h2                            2.00E+14    0.0    15000.0
602. pc3h4+ch3=c3h3+ch4                         4.00E+11    0.0     7700.0
603. pc3h4+c2h3=c3h3+c2h4                       1.00E+11    0.0     7700.0
604. pc3h4+c2h=c3h3+c2h2                        4.20E+16    0.0   100000.0
605. pc3h4+oh(+m)=>c3h4oh(+m)                   2.29E+13    0.0     1808.0
```

```
   Low pressure limit:  0.74440E+27 -0.31000E+01  0.18080E+04
   TROE centering:      0.17000E+00  0.18000E+03  0.50000E+05  0.12772E+05
606. c3h4oh=>ch2co+ch3                          3.00E+15    0.0    28000.0
607. c3h4oh=>hco+c2h4                           5.00E+14    0.0    28000.0
608. c3h4oh=>ch2o+c2h3                          1.00E+15    0.0    28000.0
609. c3h4oh=>acrol+h                            5.00E+14    0.0    28000.0
610. c3h3+o2=ch2co+hco                          3.01E+10    0.0     2870.0
611. c3h3+ho2=c3h2+h2o2                         2.00E+12    0.0        0.0
612. c3h3+oh=c3h2+h2o                           5.00E+12    0.0        0.0
613. c3h3+oh=hcco+ch3                           5.00E+12    0.0        0.0
614. c3h3+o=>c2h2+hco                           1.38E+14    0.0        0.0
615. c3h3+o=c2h3+co                             4.62E+13    0.0        0.0
616. c3h3+o=c2h+ch2o                            4.62E+13    0.0        0.0
617. c3h3+o=>c2h2+co+h                          4.62E+13    0.0        0.0
618. c3h3+h=c3h2+h2                             5.00E+13    0.0     3000.0
619. c3h3+ch=ic4h3+h                            7.00E+13    0.0        0.0
620. c3h3+ch=nc4h3+h                            7.00E+13    0.0        0.0
621. c3h3+ch2=c4h4+h                            4.00E+13    0.0        0.0
622. c3h3+ch3=c4h6                              3.33E+12    0.0        0.0
623. c3h3+c2h3=c5h5+h                           9.63E+40   -7.8    28820.0
624. ch+c2h2=c3h2+h                             1.00E+14    0.0        0.0
625. c3h2+o2=hcco+hco                           3.00E+10    0.0     2870.0
626. c3h2+oh=c2h2+hco                           5.00E+13    0.0        0.0
627. c3h2+ch2=ic4h3+h                           3.00E+13    0.0        0.0
628. c3h5o=acrol+h                              1.00E+14    0.0    29100.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           7.71E+11    0.5    17750.0
629. c3h5o=c2h3+ch2o                            2.03E+12    0.1    23560.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.50E+11    0.0    10600.0
630. c3h5o+o2=acrol+ho2                         1.00E+12    0.0     6000.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.29E+11    0.0    32000.0
631. ethco+h=h2+c2h5co                          4.00E+13    0.0     4200.0
632. ethco+oh=h2o+c2h5co                        4.20E+12    0.0      500.0
633. ethco+ho2=h2o2+c2h5co                      1.00E+12    0.0    10000.0
634. ethco+ch3=ch4+c2h5co                       2.00E-06    5.6     2500.0
635. ethco+c2h5=c2h6+c2h5co                     1.30E+12    0.0     8500.0
636. ethco+o2=c2h5co+ho2                        1.00E+13    0.0    40700.0
637. c2h5co+M=co+c2h5+M                         8.64E+15    0.0    14400.0
638. acrol+h=h2+c2h3co                          4.00E+13    0.0     4200.0
639. acrol+oh=h2o+c2h3co                        4.20E+12    0.0      500.0
640. acrol+ho2=h2o2+c2h3co                      1.00E+12    0.0    10000.0
641. acrol+ch3=ch4+c2h3co                       2.00E-06    5.6     2500.0
642. acrol+c2h5=c2h6+c2h3co                     1.30E+12    0.0     8500.0
643. acrol=c2h3+hco                             2.45E+16    0.0    84128.0
644. acrol+o=c2h3co+oh                          5.01E+12    0.0     1790.0
645. acrol+c2h3=c2h4+c2h3co                     1.74E+12    0.0     8440.0
646. acrol+ac3h5=c3h6+c2h3co                    1.00E+12    0.0     8000.0
647. c2h3co+m=>c2h3+co+m                        8.60E+15    0.0    23000.0
      h2o               Enhanced by    1.625E+01
      co                Enhanced by    1.875E+00
      co2               Enhanced by    3.750E+00
      ch4               Enhanced by    1.625E+01
      c2h6              Enhanced by    1.625E+01
648. aceton+h=h2+ch2coch3                       2.70E+07    2.0     5000.0
649. aceton+oh=h2o+ch2coch3                     7.80E+06    2.0     -765.0
650. aceton+ho2=h2o2+ch2coch3                   1.20E+12    0.0    15500.0
651. aceton+ch3=ch4+ch2coch3                    6.00E+11    0.0     9600.0
652. aceton+ch3o2=ch3o2h+ch2coch3               6.00E+11    0.0     9600.0
653. aceton+c2h5=c2h6+ch2coch3                  6.00E+11    0.0    11000.0
654. ch2coch3=ch2co+ch3                         1.00E+15    0.0    31000.0
655. ch3coch2o2=ch2coch3+o2                     9.30E+13   -1.1    27450.0
      Reverse Arrhenius coefficients:           1.20E+11    0.0    -1100.0
```

656. aceton+ch3coch2o2=ch2coch3+ch3coch2o2h	1.00E+11	0.0	5000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+10	0.0	10000.0
657. ch2o+ch3coch2o2=hco+ch3coch2o2h	1.29E+11	0.0	9000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.51E+10	0.0	10100.0
658. ho2+ch3coch2o2=ch3coch2o2h+o2	1.00E+12	0.0	0.0
659. ch3coch2o2h=ch3coch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
Reverse Arrhenius coefficients:	2.04E+09	1.6	-4375.0
660. ch3coch2o=ch3co+ch2o	8.71E+16	-1.2	13760.0
Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	11900.0
661. ch3cocho+oh=ch3coco+h2o	2.30E+10	0.7	-1100.0
662. ch3cocho+h=ch3coco+h2	4.10E+09	1.2	2405.0
663. ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2	3.00E+12	0.0	12000.0
664. ch3coco=ch3co+co	1.40E+14	0.0	6692.0
665. ch3coco+o2=co2+co2+ch3	3.00E+10	0.0	2870.0
666. ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co	2.00E+13	0.0	0.0
667. ch2co+hco=ch2cohco	2.00E+11	0.0	7800.0
668. hcoch2hco+oh=hcoch2co+h2o	4.60E+10	0.7	-1100.0
669. hcoch2hco+h=hcoch2co+h2	8.20E+09	1.2	2405.0
670. hcoch2hco+ho2=hcoch2co+h2o2	6.00E+12	0.0	12000.0
671. hcoch2hco+ch3=hcoch2co+ch4	1.52E+01	3.4	3740.0
672. hcoch2hco+o2=hcoch2co+ho2	6.00E+13	0.0	39200.0
673. hcoch2co=ch2hco+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
674. c4h10=c2h5+c2h5	2.00E+16	0.0	81300.0
675. c4h10=ch3+nc3h7	1.00E+17	0.0	85400.0
676. c4h10=pc4h9+h	1.58E+16	0.0	98000.0
677. c4h10=sc4h9+h	1.00E+16	0.0	95000.0
678. c4h10+o2=pc4h9+ho2	2.51E+13	0.0	49000.0
679. c4h10+h=pc4h9+h2	5.63E+07	2.0	7700.0
680. c4h10+o=pc4h9+oh	4.89E+06	2.4	5505.0
681. c4h10+oh=pc4h9+h2o	4.14E+07	1.7	753.0
682. c4h10+ho2=pc4h9+h2o2	1.70E+13	0.0	20460.0
683. c4h10+ch3=pc4h9+ch4	2.19E+11	0.0	11400.0
684. c4h10+c2h3=pc4h9+c2h4	1.00E+12	0.0	18000.0
685. c4h10+c2h5=pc4h9+c2h6	1.00E+11	0.0	13400.0
686. c4h10+ac3h5=pc4h9+c3h6	7.94E+11	0.0	20500.0
687. c4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh	3.00E+11	0.0	7000.0
688. c4h10+o2=sc4h9+ho2	3.98E+13	0.0	47600.0
689. c4h10+h=sc4h9+h2	4.78E+06	2.5	7369.0
690. c4h10+o=sc4h9+oh	4.28E+05	2.6	2583.0
691. c4h10+oh=sc4h9+h2o	7.23E+07	1.6	-246.0
692. c4h10+ho2=sc4h9+h2o2	4.00E+12	0.0	18150.0
693. c4h10+ch3=sc4h9+ch4	2.19E+11	0.0	9600.0
694. c4h10+c2h3=sc4h9+c2h4	7.94E+11	0.0	16800.0
695. c4h10+c2h5=sc4h9+c2h6	1.00E+11	0.0	10400.0
696. c4h10+ac3h5=sc4h9+c3h6	3.16E+11	0.0	16400.0
697. c4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh	6.00E+11	0.0	7000.0
698. c4h10+o2cho=pc4h9+ho2cho	1.68E+13	0.0	20440.0
699. c4h10+o2cho=sc4h9+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
700. pc4h9=c2h5+c2h4	2.50E+13	0.0	28824.0
701. sc4h9=ch3+c3h6	2.00E+13	0.0	31000.0
702. pc4h9=c3h6+ch3	1.26E+12	0.0	27026.0
703. pc4h9=c4h8+h	1.26E+13	0.0	38600.0
704. sc4h9=t2c4h8+h	4.57E+12	0.0	34000.0
705. sc4h9=c2c4h8+h	4.17E+12	0.0	34780.0
706. pc4h9+o2=c4h8+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
707. sc4h9+o2=c4h8+ho2	7.59E+09	0.0	-2000.0
708. sc4h9+o2=t2c4h8+ho2	9.00E+09	0.0	-2000.0
709. sc4h9+o2=c2c4h8+ho2	9.00E+09	0.0	-2000.0
710. pc4h9=sc4h9	1.39E+09	1.0	33760.0
711. pc4h9+ho2=c4h8+h2o2	2.41E+13	0.0	0.0
712. pc4h9+oh=c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
713. pc4h9+h=c4h8+h2	1.25E+13	0.0	0.0
714. pc4h9+ch3=c4h8+ch4	2.00E+12	0.0	0.0
715. pc4h9+c2h5=c4h8+c2h6	1.60E+12	0.0	0.0
716. pc4h9+ac3h5=c4h8+c3h6	1.00E+12	0.0	0.0
717. sc4h9+ho2=c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
718. sc4h9+ho2=t2c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
719. sc4h9+ho2=c2c4h8+h2o2	2.40E+13	0.0	0.0
720. sc4h9+oh=c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
721. sc4h9+oh=t2c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
722. sc4h9+oh=c2c4h8+h2o	2.40E+13	0.0	0.0
723. sc4h9+h=c4h8+h2	3.33E+13	0.0	0.0
724. sc4h9+h=t2c4h8+h2	5.00E+13	0.0	0.0
725. sc4h9+h=c2c4h8+h2	5.00E+13	0.0	0.0
726. sc4h9+ch3=c4h8+ch4	8.00E+11	0.0	0.0
727. sc4h9+ch3=t2c4h8+ch4	1.00E+12	0.0	0.0
728. sc4h9+ch3=c2c4h8+ch4	1.00E+12	0.0	0.0
729. c2c4h8=c4h6+h2	1.00E+13	0.0	65500.0
730. sc4h9=c4h8+h	2.00E+13	0.0	40400.0
731. c4h8+oh=ch2o+nc3h7	1.00E+12	0.0	0.0
732. c4h8+oh=ch3hco+c2h5	1.00E+12	0.0	0.0
733. c4h8+oh=ethco+ch3	1.00E+12	0.0	0.0
734. c4h8+oh=ch3co+c2h6	5.00E+11	0.0	0.0
735. c4h8+oh=c2h5co+ch4	5.00E+11	0.0	0.0
736. t2c4h8+oh=ch3hco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
737. c2c4h8+oh=ch3hco+c2h5	2.60E+13	0.0	0.0
738. c4h8+o=c3h6+ch2o	7.23E+05	2.3	-1050.0
739. c4h8+o=ch3hco+c2h4	1.30E+13	0.0	850.0
740. c4h8+o=c2h5+ch3co	1.62E+13	0.0	850.0
741. c2c4h8+o=ic3h7+hco	6.03E+12	0.0	0.0
742. c2c4h8+o=ch3hco+c2h4	1.00E+12	0.0	0.0
743. t2c4h8+o=ic3h7+hco	6.03E+12	0.0	0.0
744. t2c4h8+o=ch3hco+c2h4	1.00E+12	0.0	0.0
745. c4h8+ho2=>ch2o+c3h6+oh	2.50E+12	0.0	14340.0
746. c4h8+o2=Cc4h7-1+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
747. c4h8+ho2=Cc4h7-1+h2o2	6.80E+03	2.5	10115.0
748. c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
749. c4h8+o=Cc4h7-1+oh	2.60E+12	0.0	4500.0
750. c4h8+h=Cc4h7-1+h2	1.95E+13	0.0	4445.0
751. c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
752. c4h8+c2h5=Cc4h7-1+c2h6	1.00E+11	0.0	8300.0
753. c4h8+ac3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
754. c4h8+sc3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
755. c4h8+tc3h5=Cc4h7-1+c3h6	8.00E+10	0.0	12400.0
756. c4h8+o2=Dc4h7-1+ho2	1.26E+13	0.0	49000.0
757. c4h8+h=Dc4h7-1+h2	2.82E+07	2.0	7700.0
758. c4h8+o=Dc4h7-1+oh	2.44E+06	2.4	5505.0
759. c4h8+oh=Dc4h7-1+h2o	2.07E+07	1.7	753.0
760. c4h8+ho2=Dc4h7-1+h2o2	8.50E+12	0.0	20460.0
761. c4h8+ch3=Dc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
762. c4h8+c2h5=Dc4h7-1+c2h6	5.00E+10	0.0	13400.0
763. c4h8+ch3o=Dc4h7-1+ch3oh	1.50E+11	0.0	7000.0
764. c2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	9.00E+06	2.0	-60.0
765. c2c4h8+h=Cc4h7-1+h2	1.00E+13	0.0	3500.0
766. c2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	8200.0
767. t2c4h8+oh=Cc4h7-1+h2o	9.00E+06	2.0	-60.0
768. t2c4h8+h=Cc4h7-1+h2	5.00E+12	0.0	3500.0
769. t2c4h8+ch3=Cc4h7-1+ch4	1.00E+11	0.0	8200.0
770. c4h8=c2c4h8	4.00E+11	0.0	60000.0
771. c4h8=t2c4h8	4.00E+11	0.0	60000.0
772. c2c4h8=t2c4h8	3.62E+13	0.0	61330.0
773. c4h8=ac3h5+ch3	1.50E+19	-1.0	73400.0
774. c4h8=c2h3+c2h5	1.00E+19	-1.0	96770.0
775. c2c4h8=sc3h5+ch3	2.00E+16	0.0	71300.0
776. t2c4h8=sc3h5+ch3	2.00E+16	0.0	71300.0
777. c4h8=Cc4h7-1+h	4.08E+18	-1.0	97350.0
778. c2c4h8=Cc4h7-1+h	4.07E+18	-1.0	97350.0
779. t2c4h8=Cc4h7-1+h	4.07E+18	-1.0	97350.0
780. Dc4h7-1=c2h4+c2h3	5.00E+13	0.0	38000.0
781. Dc4h7-1=c4h6+h	1.00E+14	0.0	44000.0
782. Dc4h7-1+o2=c4h6+ho2	1.02E+12	0.0	22654.0
783. Dc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
784. Dc4h7-1+oh=c4h6+h2o	4.00E+13	0.0	0.0
785. Dc4h7-1+o=c4h6+oh	4.00E+13	0.0	0.0
786. Dc4h7-1+h=c4h6+h2	3.16E+13	0.0	0.0
787. Dc4h7-1+ch3=c4h6+ch4	7.94E+12	0.0	0.0
788. Dc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
789. Dc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
790. Dc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
791. Dc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
792. Dc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
793. Dc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4	4.00E+12	0.0	0.0
794. Dc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4	4.00E+12	0.0	0.0
795. Dc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6	6.30E+12	0.0	0.0
796. Dc4h7-1+Dc4h7-1=c4h6+c4h8	3.16E+12	0.0	0.0
797. Dc4h7-1+c2h4=c4h8+c2h3	1.00E+11	0.0	15000.0
798. Dc4h7-1+c3h6=c4h8+ac3h5	1.00E+11	0.0	9800.0
799. Dc4h7-1+c4h8=c4h8+Cc4h7-1	1.00E+11	0.0	8300.0
800. Dc4h7-1+t2c4h8=c4h8+Cc4h7-1	2.00E+11	0.0	9800.0
801. Dc4h7-1+c2c4h8=c4h8+Cc4h7-1	2.00E+11	0.0	9800.0
802. c4h6+Dc4h7-1=nc4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	20010.0
803. c4h6+Dc4h7-1=ic4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	18010.0
804. Dc4h7-1+ho2=ac3h5+ch2o+oh	1.00E+12	0.0	0.0
805. Dc4h7-1+ch3o2=ac3h5+ch3o+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
806. Dc4h7-1+c2h5o2=ac3h5+c2h5o+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
807. Cc4h7-1+o2=c4h6+ho2	1.02E+12	0.0	22654.0
808. Cc4h7-1=c4h6+h	1.20E+14	0.0	49300.0
809. Cc4h7-1=c2h4+c2h3	1.00E+14	0.0	49000.0
810. Cc4h7-1+ho2=c4h6+h2o2	1.00E+12	0.0	0.0
811. Cc4h7-1+oh=c4h6+h2o	4.00E+13	0.0	0.0
812. Cc4h7-1+o=c4h6+oh	4.00E+13	0.0	0.0
813. Cc4h7-1+h=c4h6+h2	3.16E+12	0.0	0.0
814. Cc4h7-1+ch3=c4h6+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
815. Cc4h7-1+c2h3=c4h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
816. Cc4h7-1+c2h5=c4h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
817. Cc4h7-1+c2h5=c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
818. Cc4h7-1+c2h5=t2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
819. Cc4h7-1+c2h5=c2c4h8+c2h4	5.00E+11	0.0	0.0
820. Cc4h7-1+c3h3=c4h6+pc3h4	4.00E+12	0.0	0.0
821. Cc4h7-1+c3h3=c4h6+ac3h4	4.00E+12	0.0	0.0
822. Cc4h7-1+ac3h5=c4h6+c3h6	6.30E+12	0.0	0.0
823. Cc4h7-1+ac3h5=c4h8+ac3h4	1.00E+12	0.0	0.0
824. Cc4h7-1+ac3h5=>mhd	3.20E+11	0.0	0.0
825. Cc4h7-1+Cc4h7-1=c4h6+c4h8	3.00E+12	0.0	0.0
826. Cc4h7-1+ho2=>acrol+ch3+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
827. Cc4h7-1+ho2=>ch3hco+c2h3+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
828. Cc4h7-1+ch3o2=>acrol+ch3+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
829. Cc4h7-1+c2h5o2=>acrol+ch3+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
830. c3h3+ch3=butyne	5.00E+12	0.0	0.0
831. butyne+ho2=nc4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000.0
832. butyne+ho2=ic4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000.0
833. butyne+oh=nc4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0
834. butyne+oh=ic4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200.0
835. butyne+oh=ch2co+c2h5	4.00E-04	4.5	-1000.0
836. butyne+o=c3h6+co	2.00E+13	0.0	1660.0
837. butyne+h=ac3h4+ch3	1.30E+05	2.5	1000.0
838. butyne+h=c2h5+c2h2	6.50E+04	2.5	1000.0
839. butyne+h=ic4h5+h2	6.50E+13	0.0	9400.0
840. butyne+h=nc4h5+h2	6.50E+13	0.0	9400.0
841. butyne+ch3=ic4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500.0
842. butyne+ch3=nc4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500.0
843. butyn2=c4h6	3.00E+13	0.0	65000.0
844. butyn2=meall	3.00E+13	0.0	67000.0
845. butyn2+h=pc3h4+ch3	2.60E+05	2.5	1000.0
846. butyne=meall	2.50E+13	0.0	65000.0
847. meall=c4h6	2.50E+13	0.0	63000.0
848. meall=c3h3+ch3	2.00E+15	0.0	75000.0
849. meall+h=ac3h4+ch3	6.00E+12	0.0	2100.0
850. meall+h=pc3h4+ch3	6.00E+12	0.0	2100.0
851. meall+oh=ic4h5+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
852. meall+h=ic4h5+h2	5.00E+07	2.0	5000.0
853. ic3h7+c2h2=c4h6+ch3	2.77E+10	0.0	6504.0
854. c4h6=c2h4+c2h2	1.00E+14	0.0	75000.0
855. c4h6=nc4h5+h	1.58E+16	0.0	110000.0
856. c4h6+o2=nc4h5+ho2	2.80E+13	0.0	62500.0
857. c4h6+o2=ic4h5+ho2	1.40E+12	0.0	50600.0
858. c4h6+ho2=nc4h5+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
859. c4h6+ho2=ic4h5+h2o2	1.00E+11	0.0	9920.0
860. c4h6+oh=nc4h5+h2o	1.00E+07	2.0	7253.0
861. c4h6+oh=ic4h5+h2o	8.00E+06	2.0	3744.0
862. c4h6+o=ic4h5+oh	4.53E+15	-0.5	7028.0
863. c4h6+o=nc4h5+oh	2.27E+15	-0.5	7028.0
864. c4h6+h=pc3h4+ch3	1.30E+03	2.5	1000.0
865. c4h6+h=ac3h4+ch3	1.00E+13	0.0	15000.0
866. c4h6+h=nc4h5+h2	5.00E+15	0.0	22800.0
867. c4h6+h=ic4h5+h2	2.50E+15	0.0	22800.0
868. c4h6+ch3=nc4h5+ch4	2.00E+14	0.0	24800.0
869. c4h6+ch3=ic4h5+ch4	4.00E+14	0.0	22800.0
870. c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	20010.0
871. c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	18010.0
872. c4h6+Cc4h7-1=nc4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	20010.0
873. c4h6+Cc4h7-1=ic4h5+c4h8	6.32E+02	3.1	18010.0
874. c4h6+oh=ch3hco+c2h3	5.60E+12	0.0	-900.0
875. c4h6+o=>ac3h5hco	3.00E+13	0.0	80.0
876. c4h6+ho2=>c4h6o2h	2.00E+11	0.0	8000.0
877. hoc4h6=>ac3h5hco+h	5.00E+14	0.0	28000.0
878. ac3h5hco=>c3h6+co	2.00E+13	0.0	57000.0
879. ac3h5hco=>c2h4+ch2co	5.00E+14	1.0	78000.0
880. ac3h5hco+o=>c2h3o+c2h3o	1.20E+08	1.4	530.0
881. ac3h5hco+oh=>ch2co+c2h3+h2o	2.02E+13	0.0	5955.0
882. ac3h5hco+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh	5.00E+12	0.0	14964.0
883. ac3h5hco+h=>ac3h5co+h2	4.10E+09	1.2	2405.0
884. ac3h5hco+oh=>ac3h5co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
885. ac3h5hco+ho2=>ac3h5co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
886. ac3h5hco+o=>ac3h5co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
887. ac3h5hco+ch3=>ac3h5co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
888. ac3h5hco+c2h3=>ac3h5co+c2h4	1.70E+12	0.0	8440.0
889. ac3h5hco+ac3h5=>ac3h5co+c3h6	1.70E+12	0.0	8440.0
890. ac3h5hco+oh=c2h3chcho+h2o	3.12E+06	2.0	-298.0
891. ac3h5hco+ho2=c2h3chcho+h2o2	9.63E+03	2.6	13910.0
892. ac3h5hco+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h	1.99E+12	0.0	17050.0
893. c4h6o2h=>acrol+oh+ch2	1.00E+10	0.0	19500.0
894. c4h6o2h=>ac3h5hco+oh	2.00E+11	0.0	19500.0
895. ac3h5co+h=>ac3h5hco	5.00E+12	0.0	0.0

896.	ac3h5co+o2=>acrol+co+oh	1.00E+12	0.0	25000.0
897.	ac3h5co=>ch2co+c2h3	1.00E+15	0.0	65000.0
898.	ac3h5co=>co+c2h2+ch3	5.00E+14	0.0	65000.0
899.	ac3h5co=>ac3h5+co	6.20E+15	-1.1	-330.0
900.	c2h3chcho+o=acrol+hco	2.00E+14	0.0	0.0
901.	c2h3chcho+ho2=oh+acrol+hco	2.00E+14	0.0	0.0
902.	c2h3+c2h3=ic4h5+h	7.00E+13	0.0	0.0
903.	ic4h5+h=ch3+c3h3	1.00E+14	0.0	0.0
904.	ic4h5+o2=c2h3co+ch2o	2.00E+11	0.0	14000.0
905.	ic4h5+o=>ch2co+c2h3	1.00E+13	0.0	2000.0
906.	ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh	1.00E+12	0.0	2000.0
907.	ic4h5+ho2=>ac3h5co+oh	1.00E+13	0.0	2000.0
908.	c3h6+ic4h5=ac3h5+c4h6	1.00E+11	0.0	9800.0
909.	ic4h5+c2h2=c4h6+c2h	1.80E+11	0.0	17300.0
910.	ic4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840.0
911.	nc4h5=c2h3+c2h2	5.00E+13	0.0	44000.0
912.	nc4h5+o2=acrol+hco	2.00E+11	0.0	14000.0
913.	nc4h5+o=>ac3h5+co	1.00E+13	0.0	2000.0
914.	nc4h5+oh=c4h4+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
915.	nc4h5+ho2=>ac3h5+co+oh	1.00E+13	0.0	0.0
916.	nc4h5+h=c4h4+h2	1.00E+14	0.0	0.0
917.	nc4h5+h=ic4h5+h	1.00E+14	0.0	0.0
918.	nc4h5+c2h2=c4h6+c2h	1.80E+11	0.0	17300.0
919.	nc4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840.0
920.	c3h6+nc4h5=ac3h5+c4h6	1.00E+11	0.0	9800.0
921.	c4h4=c2h2+c2h2	3.20E+13	0.0	77100.0
922.	c4h4+m=nc4h3+h+m	1.00E+20	0.0	99300.0
923.	c4h4=ic4h3+h	6.30E+13	0.0	87100.0
924.	c4h4=c4h2+h2	1.26E+15	0.0	94700.0
925.	c4h4+o2=nc4h3+ho2	1.00E+13	0.0	63200.0
926.	c4h4+o2=ic4h3+ho2	1.00E+13	0.0	44640.0
927.	c4h4+ho2=nc4h3+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
928.	c4h4+ho2=ic4h3+h2o2	1.00E+11	0.0	9920.0
929.	c4h4+ho2=c3h3+hco+oh	4.00E+11	0.0	8000.0
930.	c4h4+oh=ic4h3+h2o	2.00E+07	2.0	2000.0
931.	c4h4+oh=nc4h3+h2o	7.50E+06	2.0	5000.0
932.	c4h4+o=ac3h4+co	3.00E+13	0.0	1810.0
933.	c4h4+h=ic4h3+h2	3.33E+05	2.5	9240.0
934.	c4h4+h=nc4h3+h2	2.00E+07	2.0	15000.0
935.	c4h4+c2h=ic4h3+c2h2	3.98E+13	0.0	0.0
936.	c4h4+ch3=ic4h3+ch4	1.66E+01	3.7	9499.0
937.	c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000.0
938.	c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000.0
939.	c2h2+c2h2=ic4h3+h	6.31E+13	0.0	41600.0
940.	ic4h3+o2=ch2co+hcco	1.00E+12	0.0	0.0
941.	ic4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
942.	ic4h3+o=ch2co+c2h	2.00E+13	0.0	0.0
943.	ic4h3+o=h2c4o+h	2.00E+13	0.0	0.0
944.	ic4h3+h=c4h2+h2	5.00E+13	0.0	0.0
945.	ic4h3+ch2=ac3h4+c2h	2.00E+13	0.0	0.0
946.	nc4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0.0
947.	nc4h3+h=c4h2+h2	5.00E+13	0.0	0.0
948.	nc4h3+h=ic4h3+h	1.00E+14	0.0	0.0
949.	h2c4o+oh=ch2co+hcco	1.00E+07	2.0	2000.0
950.	h2c4o+h=c2h2+hcco	5.00E+13	0.0	3000.0
951.	c2h2+c2h=c4h2+h	1.82E+14	0.0	467.0
952.	c4h2+m=c4h+h+m	3.50E+17	0.0	80065.0
953.	c4h2+oh=h2c4o+h	6.66E+12	0.0	-410.0
954.	c4h2+o=c3h2+co	1.20E+12	0.0	0.0
955.	c4h+o2=c2h+co+co	1.00E+14	0.0	0.0
956.	nc3h7hco+o2=c3h7co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
957.	nc3h7hco+oh=c3h7co+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
958.	nc3h7hco+h=c3h7co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
959.	nc3h7hco+o=c3h7co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
960.	nc3h7hco+ho2=c3h7co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
961.	nc3h7hco+ch3=c3h7co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
962.	nc3h7hco+ch3o=c3h7co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
963.	nc3h7hco+ch3o2=c3h7co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
964.	nc3h7hco+oh=c3h6cho-1+h2o	5.27E+09	1.0	1586.0
965.	nc3h7hco+ho2=c3h6cho-1+h2o2	9.03E-01	3.6	7153.0
966.	nc3h7hco+ch3o2=c3h6cho-1+ch3o2h	6.03E+12	0.0	19380.0
967.	nc3h7hco+oh=ch3chch2hco+h2o	4.67E+07	1.6	-35.0
968.	nc3h7hco+ho2=ch3chch2hco+h2o2	1.48E+04	2.6	13910.0
969.	nc3h7hco+ch3o2=ch3chch2hco+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910.0
970.	c3h7co=nc3h7+co	5.32E+15	-0.9	13400.0
971.	c2h4+ch2hco=c3h6cho-1	2.11E+11	0.0	7350.0
972.	c3h6cho-1+o2=ac3h5hco+ho2	3.80E+10	0.0	-2000.0
973.	ch3chch2hco+o2=ac3h5hco+ho2	7.59E+09	0.0	-2000.0
974.	ch3chch2hco=c3h6+hco	8.25E+12	-0.2	21900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	6000.0
975.	mvk+oh=>ch2o+ch2coch3	1.40E+12	0.0	-900.0
976.	mvk+oh=>ch3+ch3cocho	1.40E+12	0.0	-900.0
977.	c2h3+ch2co=ch2coc2h3	2.11E+11	0.0	7350.0
978.	c2h5+nc3h7=nc5h12	5.20E+12	0.0	0.0
979.	nc5h12+h=h2+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
980.	nc5h12+oh=h2o+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
981.	nc5h12+ho2=h2o2+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
982.	nc5h12+ch3=ch4+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
983.	nc5h12+ch3o2=ch3o2h+ch3+2c2h4	4.50E+12	0.0	17500.0
984.	nc5h12+c2h5=c2h6+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
985.	nc5h12+o=oh+ch3+2c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
986.	nc5h12+o2cho=Ac5h11+ho2cho	1.68E+13	0.0	20440.0
987.	nc5h12+o2cho=Bc5h11+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
988.	nc5h12+o2cho=Cc5h11+ho2cho	5.60E+12	0.0	17690.0
989.	Ac5h11=nc3h7+c2h4	4.50E+13	0.0	28700.0
990.	Bc5h11=c2h5+c3h6	4.50E+13	0.0	29700.0
991.	Cc5h11=ch3+c4h8	4.20E+13	0.0	31000.0
992.	Ac5h11=h+c5h10	3.41E+15	-0.7	36589.0
993.	Bc5h11=h+c5h10	6.76E+12	0.1	37652.0
994.	Bc5h11=h+c2c5h10	2.22E+15	-0.7	37356.0
995.	Bc5h11=h+t2c5h10	1.14E+15	-0.7	36161.0
996.	Cc5h11=h+c2c5h10	4.44E+15	-0.7	37310.0
997.	Cc5h11=h+t2c5h10	2.28E+15	-0.7	36114.0
998.	Ac5h11+o2=c5h10+ho2	1.50E-19	0.0	5000.0
999.	Bc5h11+o2=c2c5h10+ho2	1.00E+11	0.0	5020.0
1000.	Bc5h11+o2=t2c5h10+ho2	2.00E+11	0.0	5020.0
1001.	Bc5h11+o2=c5h10+ho2	2.00E+11	0.0	5020.0
1002.	Cc5h11+o2=c2c5h10+ho2	3.58E+09	0.0	-3532.0
1003.	Cc5h11+o2=t2c5h10+ho2	3.58E+09	0.0	-3532.0
1004.	Ac5h11=Bc5h11	1.00E+12	0.0	22515.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.00E+11	0.0	23906.0
1005.	Ac5h11=Cc5h11	3.00E+11	0.0	24045.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	25436.0
1006.	Ac5h11+ho2=>ch2o+pc4h9+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1007.	Ac5h11+o=ch2o+pc4h9	1.61E+13	0.0	0.0
1008.	Ac5h11+o2=ch2o+oh+c4h8	2.10E+11	0.0	6158.0
1009.	Bc5h11+ho2=>ch3hco+oh+nc3h7	1.00E+13	0.0	0.0
1010.	Bc5h11+o=ch3hco+nc3h7	1.61E+13	0.0	0.0
1011.	Bc5h11+o2=>oh+ch3hco+c3h6	2.10E+11	0.0	6158.0
1012.	Cc5h11+ho2=>oh+ethco+c2h5	1.00E+13	0.0	0.0
1013.	Cc5h11+o=ethco+c2h5	1.61E+13	0.0	0.0
1014.	Cc5h11+o2=>oh+ethco+c2h4	2.10E+11	0.0	6158.0
1015.	c5h10=c2h5+ac3h5	9.17E+20	-1.6	73990.0
1016.	c5h10+ch3=nc3h7+c3h6	9.60E+10	0.0	8000.0
1017.	c2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8	1.70E+11	0.0	7400.0
1018.	t2c5h10+ch3=>c2h5+c4h8	1.70E+11	0.0	7400.0
1019.	c5h10+oh=pc4h9+ch2o	1.00E+11	0.0	0.0
1020.	c5h10+oh=nc3h7+ch3hco	1.00E+11	0.0	0.0
1021.	c2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco	1.00E+12	0.0	0.0
1022.	t2c5h10+oh=>ch3+nc3h7hco	1.00E+12	0.0	0.0
1023.	c2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9	1.00E+12	0.0	0.0
1024.	t2c5h10+oh=>ch2o+pc4h9	1.00E+12	0.0	0.0
1025.	c5h10+o=pc4h9+hco	1.00E+11	0.0	0.0
1026.	c5h10+o=nc3h7+ch3co	1.00E+11	0.0	0.0
1027.	c2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1028.	t2c5h10+o=>ch2co+ch3+h+c2h4	3.40E+07	1.8	550.0
1029.	c5h10+h=h2+Cc5h9-1	5.40E+04	2.5	-1900.0
1030.	c5h10+oh=h2o+Cc5h9-1	2.25E+13	0.0	2217.0
1031.	c5h10+ho2=Cc5h9-1+h2o2	6.80E+03	2.5	10115.0
1032.	c5h10+ch3=ch4+Cc5h9-1	1.00E+11	0.0	7300.0
1033.	c5h10+ch3o2=ch3o2h+Cc5h9-1	1.00E+12	0.0	14550.0
1034.	c5h10+c2h5=c2h6+Cc5h9-1	4.40E+00	3.5	4140.0
1035.	c5h10+o=oh+Cc5h9-1	8.80E+10	0.7	3250.0
1036.	c5h10+h=Dc5h9-1+h2	9.00E+06	2.0	5000.0
1037.	c5h10+oh=Dc5h9-1+h2o	1.00E+06	2.0	-597.0
1038.	c5h10+ho2=Dc5h9-1+h2o2	2.00E+04	2.5	14208.0
1039.	c5h10+h=Ec5h9-1+h2	2.85E+07	2.0	7700.0
1040.	c5h10+oh=Ec5h9-1+h2o	7.05E+06	1.8	974.0
1041.	c5h10+ho2=Ec5h9-1+h2o2	1.80E+04	2.5	16683.0
1042.	sc3h5+c2h5=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1043.	sc3h5+c2h5=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1044.	Cc5h9-1=c4h6+ch3	6.50E+12	0.0	38200.0
1045.	Dc5h9-1=c5h8-13+h	3.20E+13	0.0	34800.0
1046.	Ec5h9-1=ac3h5+c2h4	3.30E+13	0.0	22500.0
1047.	Cc5h9-1+h=c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1048.	Cc5h9-1+h=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1049.	Cc5h9-1+h=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1050.	Cc5h9-1=c5h8-13+h	1.50E+13	0.0	50500.0
1051.	Cc5h9-1+o2=c5h8-13+ho2	5.90E+05	0.0	0.0
1052.	Cc5h9-1+ho2=>acrol+c2h5+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
1053.	Cc5h9-1+ho2=>ethco+c2h3+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
1054.	Cc5h9-1+h=c5h8-13+h2	3.16E+13	0.0	0.0
1055.	Cc5h9-1+ch3=c5h8-13+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
1056.	Cc5h9-1+c2h3=c5h8-13+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
1057.	Cc5h9-1+c2h5=c5h8-13+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
1058.	Cc5h9-1+ac3h5=c5h8-13+c3h6	1.33E+12	0.0	0.0
1059.	nc4h5+ch3=c5h8-13	2.00E+13	0.0	0.0
1060.	sc3h5+c2h3=c5h8-13	1.00E+13	0.0	0.0
1061.	ac3h5+c2h3=c5h8-13	1.00E+13	0.0	0.0
1062.	ic4h5+ch3=c5h8-13	4.80E+37	-7.6	11359.0
1063.	c5h8-13+o2=acrol+ch3hco	2.00E+08	1.5	30200.0
1064.	c5h8-13+ho2=>acrol+c2h4+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
1065.	c5h8-13+ho2=>c4h6+ch2o+oh	5.00E+11	0.0	19000.0
1066.	c5h8-13+oh=ch3hco+ac3h5	6.00E+12	0.0	-393.0
1067.	c5h8-13+oh=ch2o+Cc4h7-1	6.00E+12	0.0	-393.0
1068.	c5h8-13+o=acrol+c2h4	4.50E+08	1.4	-858.0
1069.	c5h8-13+o=ch2o+c4h6	4.50E+08	1.4	-858.0
1070.	c5h8-13+h=c5h7+h2	7.00E+06	2.0	0.0
1071.	c5h8-13+h=ac3h5+c2h4	3.35E+08	1.5	2000.0
1072.	c5h8-13+oh=c5h7+h2o	7.00E+06	2.0	0.0
1073.	c5h8-13+ho2=c5h7+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
1074.	c5h8-13+ch3=c5h7+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0
1075.	c5h8-14+oh=c5h7+h2o	3.00E+06	2.0	-1520.0
1076.	c5h8-14+h=c5h7+h2	5.50E+04	2.5	-1900.0
1077.	c5h8-14+o=c5h7+oh	9.00E+10	0.7	3250.0
1078.	c5h8-14+ho2=c5h7+h2o2	7.50E+03	2.6	12400.0
1079.	c5h8-14+ch3=c5h7+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
1080.	c5h7+o=acrol+c2h3	2.00E+14	0.0	0.0
1081.	c5h7+h=c5h8-13	1.00E+14	0.0	0.0
1082.	c5h7=CPD+h	2.00E+11	0.0	18000.0
1083.	c5h7+cyc6h12=c5h8-13+cyc6h11	1.00E+12	0.0	10000.0
1084.	nc4h9hco+o2=nc4h9co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
1085.	nc4h9hco+oh=nc4h9co+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
1086.	nc4h9hco+h=nc4h9co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
1087.	nc4h9hco+o=nc4h9co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
1088.	nc4h9hco+ho2=nc4h9co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
1089.	nc4h9hco+ch3=nc4h9co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
1090.	nc4h9hco+ch3o=nc4h9co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
1091.	nc4h9hco+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
1092.	nc4h9co+M=co+pc4h9+M	8.64E+15	0.0	14400.0
1093.	nc4h9co+ho2=>co2+oh+pc4h9	2.00E+13	0.0	0.0
1094.	Dc5h9-2+h=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1095.	Dc5h9-2+h=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0.0
1096.	Dc5h9-2=c5h8-13+h	1.20E+14	0.0	49300.0
1097.	Dc5h9-2+o2=c5h8-13+ho2	1.00E+11	0.0	0.0
1098.	Dc5h9-2+ho2=>ch3hco+sc3h5+oh	1.00E+13	0.0	0.0
1099.	Dc5h9-2+h=c5h8-13+h2	3.16E+12	0.0	0.0
1100.	Dc5h9-2+ch3=c5h8-13+ch4	1.00E+13	0.0	0.0
1101.	Dc5h9-2+c2h3=c5h8-13+c2h4	4.00E+12	0.0	0.0
1102.	Dc5h9-2+c2h5=c5h8-13+c2h6	4.00E+12	0.0	0.0
1103.	Dc5h9-2+ac3h5=c5h8-13+c3h6	4.00E+12	0.0	0.0
1104.	Dc5h9-2+Cc4h7-1=c5h8-13+c4h8	3.16E+12	0.0	0.0
1105.	Ac5h9-1=cyc5h8+h	2.28E+11	0.0	18277.0
1106.	Ac5h9-1+ho2=>nc3h7+ch2co+oh	5.00E+12	0.0	8000.0
1107.	Ec5h9-1=cyc5h8+h	6.90E-03	0.0	-4213.0
1108.	isoph=isope+h	1.00E+14	0.0	44000.0
1109.	isoph=c2h4+tc3h5	5.00E+13	0.0	38000.0
1110.	isope+ho2=isopy+h2o2	2.00E+05	2.6	13910.0
1111.	isope+oh=isopy+h2o	2.00E+07	2.0	5000.0
1112.	c4h4+ch3=isopy	2.50E+13	0.0	0.0
1113.	isopy=c2h3+ac3h4	2.00E+13	0.0	48700.0
1114.	isopy+o2=ch2o+ch2coc2h3	3.08E+09	0.4	16910.0
1115.	c6h14=nc3h7+nc3h7	7.36E+28	-3.0	93270.0
1116.	c6h14=c2h5+pc4h9	2.75E+29	-3.3	92039.0
1117.	c6h14=ch3+Ac5h11	3.83E+24	-1.9	93137.0
1118.	c6h14=h+Ac6h13	7.93E+18	-0.4	104311.0
1119.	c6h14=h+Bc6h13	1.14E+19	-0.4	102069.0
1120.	c6h14=h+Cc6h13	1.37E+19	-0.4	102119.0
1121.	c6h14+o2=ho2+Ac6h13	4.00E+13	0.0	50870.0
1122.	c6h14+o2=ho2+Bc6h13	8.00E+13	0.0	47690.0
1123.	c6h14+o2=ho2+Cc6h13	8.00E+13	0.0	47690.0
1124.	c6h14+oh=h2o+Ac6h13	1.05E+10	1.0	1590.0
1125.	c6h14+oh=h2o+Bc6h13	9.36E+07	1.6	-35.0
1126.	c6h14+oh=h2o+Cc6h13	9.36E+07	1.6	-35.0
1127.	c6h14+ho2=h2o2+Ac6h13	3.60E+04	2.5	16683.0
1128.	c6h14+ho2=h2o2+Bc6h13	4.00E+04	2.5	14208.0
1129.	c6h14+ho2=h2o2+Cc6h13	4.00E+04	2.5	14208.0
1130.	c6h14+h=h2+Ac6h13	5.70E+07	2.0	7700.0
1131.	c6h14+h=h2+Bc6h13	1.80E+07	2.0	5000.0
1132.	c6h14+h=h2+Cc6h13	1.80E+07	2.0	5000.0
1133.	o+c6h14=oh+Ac6h13	1.00E+14	0.0	7850.0
1134.	o+c6h14=oh+Bc6h13	5.20E+13	0.0	5200.0
1135.	o+c6h14=oh+Cc6h13	5.20E+13	0.0	5200.0
1136.	c6h14+ch3=ch4+Ac6h13	6.00E-01	4.0	8200.0

1137.	c6h14+ch3=ch4+Bc6h13	4.00E+11	0.0	9600.0
1138.	c6h14+ch3=ch4+Cc6h13	4.00E+11	0.0	9600.0
1139.	c6h14+c2h5=c2h6+Ac6h13	6.00E+11	0.0	13500.0
1140.	c6h14+c2h5=c2h6+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11000.0
1141.	c6h14+c2h5=c2h6+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11000.0
1142.	c6h14+hco=ch2o+Ac6h13	2.00E+05	2.5	18500.0
1143.	c6h14+hco=ch2o+Bc6h13	2.20E+07	1.9	17000.0
1144.	c6h14+hco=ch2o+Cc6h13	2.20E+07	1.9	17000.0
1145.	c6h14+ch3o=ch3oh+Ac6h13	3.20E+11	0.0	7300.0
1146.	c6h14+ch3o=ch3oh+Bc6h13	2.90E+11	0.0	4500.0
1147.	c6h14+ch3o=ch3oh+Cc6h13	2.90E+11	0.0	4500.0
1148.	c6h14+ch2oh=ch3oh+Ac6h13	2.00E+02	3.0	14000.0
1149.	c6h14+ch2oh=ch3oh+Bc6h13	1.20E+02	3.0	12000.0
1150.	c6h14+ch2oh=ch3oh+Cc6h13	1.20E+02	3.0	12000.0
1151.	c6h14+ch3o2=ch3o2h+Ac6h13	1.20E+13	0.0	20000.0
1152.	c6h14+ch3o2=ch3o2h+Bc6h13	6.00E+12	0.0	17500.0
1153.	c6h14+ch3o2=ch3o2h+Cc6h13	6.00E+12	0.0	17500.0
1154.	c6h14+ch2hco=ch3hco+Ac6h13	6.00E+11	0.0	13700.0
1155.	c6h14+ch2hco=ch3hco+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1156.	c6h14+ch2hco=ch3hco+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1157.	c6h14+ch3co=ch3hco+Ac6h13	3.00E+11	0.0	15000.0
1158.	c6h14+ch3co=ch3hco+Bc6h13	2.00E+11	0.0	12700.0
1159.	c6h14+ch3co=ch3hco+Cc6h13	2.00E+11	0.0	12700.0
1160.	c6h14+nc3h7=c3h8+Ac6h13	6.00E+11	0.0	13700.0
1161.	c6h14+nc3h7=c3h8+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1162.	c6h14+nc3h7=c3h8+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1163.	c6h14+pc4h9=c4h10+Ac6h13	6.00E+11	0.0	13700.0
1164.	c6h14+pc4h9=c4h10+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1165.	c6h14+pc4h9=c4h10+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1166.	c6h14+Ac5h11=nc5h12+Ac6h13	6.00E+11	0.0	13700.0
1167.	c6h14+Ac5h11=nc5h12+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1168.	c6h14+Ac5h11=nc5h12+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1169.	c6h14+Ac6h13=c6h14+Bc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1170.	c6h14+Ac6h13=c6h14+Cc6h13	4.00E+11	0.0	11400.0
1171.	c6h14+Bc6h13=c6h14+Cc6h13	4.00E+11	0.0	12400.0
1172.	c6h14+o2cho=Ac6h13+ho2cho	1.68E+13	0.0	20440.0
1173.	c6h14+o2cho=Bc6h13+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
1174.	c6h14+o2cho=Cc6h13+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
1175.	Ac6h13=pc4h9+c2h4	1.02E+12	0.3	27276.0
1176.	Bc6h13=nc3h7+c3h6	4.47E+11	0.6	28047.0
1177.	Cc6h13=c2h5+c4h8	3.55E+12	0.3	28246.0
1178.	Cc6h13=ch3+c5h10	8.13E+10	0.8	29651.0
1179.	Ac6h13=h+c6h12-1	1.39E+16	-0.9	36837.0
1180.	Bc6h13=h+c6h12-1	1.63E+16	-0.8	37690.0
1181.	Bc6h13=h+c6h12-2	8.76E+15	-1.2	37213.0
1182.	Cc6h13=h+c6h12-2	7.33E+15	-1.2	37163.0
1183.	Cc6h13=h+c6h12-3	7.33E+15	-1.2	37163.0
1184.	Ac6h13+o2=c6h12-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1185.	Bc6h13+o2=c6h12-1+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1186.	Bc6h13+o2=c6h12-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1187.	Cc6h13+o2=c6h12-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1188.	Cc6h13+o2=c6h12-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1189.	Ac6h13=Bc6h13	1.82E+02	2.5	10961.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+01	2.9	13380.0
1190.	Ac6h13=Cc6h13	6.92E+00	3.2	16559.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.08E+00	3.2	18938.0
1191.	c6h12-1=nc3h7+ac3h5	2.50E+16	0.0	70000.0
1192.	c2h3+pc4h9=c6h12-1	1.00E+13	0.0	0.0
1193.	c6h12-1=c3h6+c3h6	4.00E+12	0.0	57430.0
1194.	Cc6h11-1+h=c6h12-1	1.00E+13	0.0	0.0
1195.	c6h12-1=Dc4h7-1+c2h5	1.31E+23	-1.9	87446.0
1196.	c6h12-1=Ec5h9-1+ch3	9.65E+21	-1.5	89648.0
1197.	c6h12-1+oh=Ac5h11+ch2o	1.00E+11	0.0	-4000.0
1198.	c6h12-1+o=Ac5h11+hco	1.00E+11	0.0	-1050.0
1199.	c6h12-1+o2=Cc6h11-1+ho2	4.00E+12	0.0	40000.0
1200.	c6h12-1+ho2=h2o2+Cc6h11-1	6.80E+03	2.5	10115.0
1201.	c6h12-1+o=oh+Cc6h11-1	4.00E+13	0.0	4000.0
1202.	c6h12-1+h=h2+Cc6h11-1	6.55E+12	0.0	4445.0
1203.	c6h12-1+oh=h2o+Cc6h11-1	6.00E+13	0.0	1230.0
1204.	c6h12-1+ch3=ch4+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1205.	c6h12-1+c2h3=c2h4+Cc6h11-1	2.00E+11	0.0	6800.0
1206.	c6h12-1+nc3h7=c3h8+Cc6h11-1	1.00E+11	0.0	8300.0
1207.	c6h12-1+oh=h2o+ch3+c5h8-14	1.12E+06	2.0	-1391.0
1208.	c6h12-1+oh=h2o+ac3h5+c3h6	1.00E+06	2.0	-597.0
1209.	c6h12-1+o2=ho2+Fc6h11-1	2.10E+13	0.0	51300.0
1210.	c6h12-1+oh=h2o+Fc6h11-1	7.05E+06	1.8	974.0
1211.	c6h12-2+o2=Cc6h11-1+ho2	1.95E+12	0.0	39000.0
1212.	c6h12-2+ho2=Cc6h11-1+h2o2	1.50E+11	0.0	14190.0
1213.	c6h12-2+oh=Cc6h11-1+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
1214.	c6h12-2+o=Cc6h11-1+oh	1.75E+11	0.7	5884.0
1215.	c6h12-2+h=Cc6h11-1+h2	6.46E+12	0.0	4445.0
1216.	c6h12-2+ch3=Cc6h11-1+ch4	1.60E+11	0.0	8800.0
1217.	c6h12-2+c2h5=Cc6h11-1+c2h6	1.00E+11	0.0	9800.0
1218.	c6h12-2+c2h3=Cc6h11-1+c2h4	2.21E+00	3.5	4682.0
1219.	c6h12-2+ho2=h2o2+Bc6h11-3	1.00E+11	0.0	17060.0
1220.	c6h12-2+o=oh+Bc6h11-3	4.00E+13	0.0	4000.0
1221.	c6h12-2+h=h2+Bc6h11-3	6.55E+12	0.0	4445.0
1222.	c6h12-2+oh=h2o+Bc6h11-3	4.19E+06	2.0	-543.0
1223.	c6h12-2+ch3=ch4+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	6800.0
1224.	c6h12-2+c2h3=c2h4+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	6800.0
1225.	c6h12-2+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	8300.0
1226.	c6h12-3+ho2=h2o2+Bc6h11-3	2.00E+11	0.0	17060.0
1227.	c6h12-3+o=oh+Bc6h11-3	8.00E+13	0.0	4000.0
1228.	c6h12-3+h=h2+Bc6h11-3	1.31E+13	0.0	4445.0
1229.	c6h12-3+oh=h2o+Bc6h11-3	8.37E+06	2.0	-543.0
1230.	c6h12-3+ch3=ch4+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	6800.0
1231.	c6h12-3+c2h3=c2h4+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	6800.0
1232.	c6h12-3+nc3h7=c3h8+Bc6h11-3	4.00E+11	0.0	8300.0
1233.	Fc6h11-1=Cc6h11-1	1.00E+12	0.0	29880.0
1234.	Cc6h11-1=c2h5+c4h6	4.00E+10	0.0	38250.0
1235.	Cc6h11-1=c5h8-13+ch3	1.00E+12	0.0	50000.0
1236.	Cc6h11-1+ho2=>nc3h7+acrol+oh	1.00E+12	0.0	8000.0
1237.	Fc6h11-1=c2h4+Dc4h7-1	1.00E+12	0.0	35000.0
1238.	Fc6h11-1=cyc6h11	1.00E+08	0.9	5900.0
1239.	c2h4+Ac4h7-1=Ac6h11-3	2.00E+11	0.0	2010.0
1240.	Bc6h11-3=c5h8-13+ch3	2.00E+13	0.0	42320.0
1241.	ac3h5+ac3h5=c6h10-15	1.02E+13	0.0	-263.0
1242.	Cc4h7-1+c2h3=c6h10-15	1.00E+12	0.0	0.0
1243.	c6h10-15+o2=c6h9+ho2	1.00E+11	0.0	25050.0
1244.	c6h10-15+ho2=c6h9+h2o2	1.64E+11	0.0	12583.0
1245.	c6h10-15+oh=c6h9+h2o	5.60E+12	0.0	861.0
1246.	c6h10-15+h=c6h9+h2	1.00E+14	0.0	3900.0
1247.	c6h10-15+ch3=c6h9+ch4	2.50E+11	0.0	8300.0
1248.	c6h10-15+c2h5=c6h9+c2h6	1.00E+11	0.0	8300.0
1249.	c6h10-15+c2h3=c6h9+c2h4	6.30E+12	0.0	13000.0
1250.	c6h10-15+ac3h5=c6h9+c3h6	1.00E+12	0.0	10500.0
1251.	c6h10-13=c2h2+c4h8	1.00E+14	0.0	75000.0
1252.	c5h11hco+o2=c5h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
1253.	c5h11hco+oh=c5h11co+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
1254.	c5h11hco+h=c5h11co+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
1255.	c5h11hco+o=c5h11co+oh	5.00E+12	0.0	1790.0
1256.	c5h11hco+ho2=c5h11co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600.0
1257.	c5h11hco+ch3=c5h11co+ch4	1.70E+12	0.0	8440.0
1258.	c5h11hco+ch3o=c5h11co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280.0
1259.	c5h11hco+ch3o2=c5h11co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500.0
1260.	c5h11co+M=co+Ac5h11+M	8.64E+15	0.0	14400.0
1261.	c5h11co+ho2=>co2+oh+Ac5h11	2.00E+13	0.0	0.0
1262.	c6h7C=Lc6h7	2.50E+14	0.7	41800.0
1263.	Lc6h7=c2h2+nc4h5	3.16E+13	0.0	43100.0
1264.	Lc6h7=Lc6h6+h	3.98E+12	0.0	36500.0
1265.	Lc6h7+oh=Lc6h6+h2o	2.00E+07	2.0	1000.0
1266.	Lc6h7+h=Lc6h6+h2	2.00E+07	2.0	1000.0
1267.	Lc6h7+o2=chocho+nc4h5	1.00E+12	0.0	0.0
1268.	Lc6h7+o2=Lc6h6+ho2	1.00E+07	2.0	10000.0
1269.	Lc6h6+o2=>acrol+hco+c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
1270.	c6h5=U-c6h5	3.00E+13	0.0	72896.7
1271.	U-c6h5=c2h2+nc4h3	3.16E+13	0.0	43100.0
1272.	U-c6h5=Lc6h4+h	3.98E+12	0.0	36500.0
1273.	Lc6h4+o2=>2hco+2c2h	2.00E+08	1.5	30200.0
1274.	nc7h16=nc3h7+pc4h9	1.22E+27	-3.0	89757.5
1275.	nc7h16=c2h5+Ac5h11	4.49E+25	-2.6	88135.0
1276.	nc7h16=ch3+Ac6h13	5.27E+22	-1.8	89834.0
1277.	nc7h16=h+Ac7h15	1.07E+17	-0.3	101045.0
1278.	nc7h16=h+Bc7h15	1.60E+17	-0.3	98008.0
1279.	nc7h16=h+Cc7h15	2.02E+17	-0.3	98866.0
1280.	nc7h16=h+Dc7h15	1.03E+17	-0.3	98868.0
1281.	nc7h16+o2=Ac7h15+ho2	4.00E+13	0.0	50870.0
1282.	nc7h16+o2=Bc7h15+ho2	8.00E+13	0.0	47690.0
1283.	nc7h16+o2=Cc7h15+ho2	8.00E+13	0.0	47690.0
1284.	nc7h16+o2=Dc7h15+ho2	4.00E+13	0.0	47690.0
1285.	nc7h16+oh=h2o+Ac7h15	1.05E+10	1.0	1590.0
1286.	nc7h16+oh=h2o+Bc7h15	9.36E+07	1.6	-35.0
1287.	nc7h16+oh=h2o+Cc7h15	9.36E+07	1.6	-35.0
1288.	nc7h16+oh=h2o+Dc7h15	4.68E+07	1.6	-35.0
1289.	nc7h16+ho2=h2o2+Ac7h15	3.60E+04	2.5	16683.0
1290.	nc7h16+ho2=h2o2+Bc7h15	4.00E+04	2.5	14208.0
1291.	nc7h16+ho2=h2o2+Cc7h15	4.00E+04	2.5	14208.0
1292.	nc7h16+ho2=h2o2+Dc7h15	2.00E+04	2.5	14208.0
1293.	nc7h16+h=h2+Ac7h15	5.70E+07	2.0	7700.0
1294.	nc7h16+h=h2+Bc7h15	1.80E+07	2.0	5000.0
1295.	nc7h16+h=h2+Cc7h15	1.80E+07	2.0	5000.0
1296.	nc7h16+h=h2+Dc7h15	9.00E+06	2.0	5000.0
1297.	o+nc7h16=oh+Ac7h15	1.00E+14	0.0	7850.0
1298.	o+nc7h16=oh+Bc7h15	5.20E+13	0.0	5200.0
1299.	o+nc7h16=oh+Cc7h15	5.20E+13	0.0	5200.0
1300.	o+nc7h16=oh+Dc7h15	2.60E+13	0.0	5200.0
1301.	nc7h16+ch3=ch4+Ac7h15	6.00E-01	4.0	8200.0
1302.	nc7h16+ch3=ch4+Bc7h15	4.00E+11	0.0	9600.0
1303.	nc7h16+ch3=ch4+Cc7h15	4.00E+11	0.0	9600.0
1304.	nc7h16+ch3=ch4+Dc7h15	2.00E+11	0.0	9600.0
1305.	nc7h16+c2h5=c2h6+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13500.0
1306.	nc7h16+c2h5=c2h6+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11000.0
1307.	nc7h16+c2h5=c2h6+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11000.0
1308.	nc7h16+c2h5=c2h6+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11000.0
1309.	nc7h16+hco=ch2o+Ac7h15	2.00E+05	2.5	18500.0
1310.	nc7h16+hco=ch2o+Bc7h15	2.20E+07	1.9	17000.0
1311.	nc7h16+hco=ch2o+Cc7h15	2.20E+07	1.9	17000.0
1312.	nc7h16+hco=ch2o+Dc7h15	1.10E+07	1.9	17000.0
1313.	nc7h16+ch3o=ch3oh+Ac7h15	3.20E+11	0.0	7300.0
1314.	nc7h16+ch3o=ch3oh+Bc7h15	2.90E+11	0.0	4500.0
1315.	nc7h16+ch3o=ch3oh+Cc7h15	2.90E+11	0.0	4500.0
1316.	nc7h16+ch3o=ch3oh+Dc7h15	1.45E+11	0.0	4500.0
1317.	nc7h16+ch2oh=ch3oh+Ac7h15	2.00E+02	3.0	14000.0
1318.	nc7h16+ch2oh=ch3oh+Bc7h15	1.20E+02	3.0	12000.0
1319.	nc7h16+ch2oh=ch3oh+Cc7h15	1.20E+02	3.0	12000.0
1320.	nc7h16+ch2oh=ch3oh+Dc7h15	6.00E+01	3.0	12000.0
1321.	nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Ac7h15	1.20E+13	0.0	20000.0
1322.	nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Bc7h15	6.00E+12	0.0	17500.0
1323.	nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Cc7h15	6.00E+12	0.0	17500.0
1324.	nc7h16+ch3o2=ch3o2h+Dc7h15	3.00E+12	0.0	17500.0
1325.	nc7h16+ch2hco=ch3hco+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
1326.	nc7h16+ch2hco=ch3hco+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1327.	nc7h16+ch2hco=ch3hco+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1328.	nc7h16+ch2hco=ch3hco+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
1329.	nc7h16+ch3co=ch3hco+Ac7h15	3.00E+11	0.0	15000.0
1330.	nc7h16+ch3co=ch3hco+Bc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
1331.	nc7h16+ch3co=ch3hco+Cc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
1332.	nc7h16+ch3co=ch3hco+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12700.0
1333.	nc7h16=nc3h7+c3h8+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
1334.	nc7h16=nc3h7+c3h8+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1335.	nc7h16=nc3h7+c3h8+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1336.	nc7h16=nc3h7+c3h8+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
1337.	nc7h16+pc4h9=c4h10+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
1338.	nc7h16+pc4h9=c4h10+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1339.	nc7h16+pc4h9=c4h10+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1340.	nc7h16+pc4h9=c4h10+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
1341.	nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
1342.	nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1343.	nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1344.	nc7h16+Ac5h11=nc5h12+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
1345.	nc7h16+Ac6h13=c6h14+Ac7h15	6.00E+11	0.0	13700.0
1346.	nc7h16+Ac6h13=c6h14+Bc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1347.	nc7h16+Ac6h13=c6h14+Cc7h15	4.00E+11	0.0	11400.0
1348.	nc7h16+Ac6h13=c6h14+Dc7h15	2.00E+11	0.0	11400.0
1349.	nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Bc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
1350.	nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Cc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
1351.	nc7h16+Ac7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
1352.	nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Cc7h15	4.00E+11	0.0	12400.0
1353.	nc7h16+Bc7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
1354.	nc7h16+Cc7h15=nc7h16+Dc7h15	2.00E+11	0.0	12400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+11	0.0	12400.0
1355.	nc7h16+o2cho=Ac7h15+ho2cho	1.68E+13	0.0	20440.0
1356.	nc7h16+o2cho=Bc7h15+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
1357.	nc7h16+o2cho=Cc7h15+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
1358.	nc7h16+o2cho=Dc7h15+ho2cho	5.60E+12	0.0	17690.0
1359.	Ac7h15=Ac5h11+c2h4	9.12E+11	0.3	27240.5
1360.	Bc7h15=pc4h9+c3h6	6.02E+10	0.8	27823.0
1361.	Cc7h15=nc3h7+c4h8	5.50E+11	0.6	28087.0
1362.	Cc7h15=ch3+c6h12-1	9.55E+09	1.1	29391.0
1363.	Dc7h15=c2h5+c5h10	1.70E+10	1.1	27026.0
1364.	Ac7h15=h+c7h14-1	3.00E+13	0.0	38000.0
1365.	Bc7h15=h+c7h14-1	3.00E+13	0.0	38000.0
1366.	Bc7h15=h+c7h14-2	3.00E+13	0.0	38000.0
1367.	Cc7h15=h+c7h14-2	3.00E+13	0.0	38000.0
1368.	Cc7h15=h+c7h14-3	3.00E+13	0.0	38000.0
1369.	Dc7h15=h+c7h14-3	6.00E+13	0.0	38000.0
1370.	Ac7h15+o2=c7h14-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
1371.	Bc7h15+o2=c7h14-1+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1372.	Bc7h15+o2=c7h14-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1373.	Cc7h15+o2=c7h14-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1374.	Cc7h15+o2=c7h14-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1375.	Dc7h15+o2=c7h14-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000.0
1376.	Ac7h15=Bc7h15	2.95E+00	3.1	11017.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.31E+00	3.1	13073.0

1377. Ac7h15=Cc7h15 2.29E+01 2.8 10757.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.86E+00 3.2 12849.0
1378. Ac7h15=Dc7h15 5.13E+00 3.2 16849.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.34E-01 3.6 18942.0
1379. Bc7h15=Cc7h15 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.41E+00 3.3 16146.0
1380. c2h3+Ac5h11=c7h14-1 1.00E+13 0.0 0.0
1381. c7h14-1=c3h6+c4h8 4.00E+12 0.0 57430.0
1382. c7h14-1=ac3h5+pc4h9 2.50E+16 0.0 70000.0
1383. c7h14-1=Dc4h7-1+nc3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
1384. c7h14-1=Ec5h9-1+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
1385. c7h14-1=Fc6h11-1+ch3 1.00E+16 0.0 71000.0
1386. Cc7h13-1+h=c7h14-1 1.00E+13 0.0 0.0
1387. Dc7h13-2+h=c7h14-2 1.00E+13 0.0 0.0
1388. Ec7h13-3+h=c7h14-3 1.00E+13 0.0 0.0
1389. c7h14-1+ho2=>oh+ch2o+c6h12-1 2.50E+12 1.0 25000.0
1390. c7h14-2+ho2=>oh+ch3hco+c5h10 2.50E+12 1.0 25000.0
1391. c7h14-2+ho2=>oh+c2h4+nc4h9hco 2.50E+12 1.0 25000.0
1392. c7h14-3+ho2=>oh+ethco+c4h8 2.50E+12 1.0 25000.0
1393. c7h14-3+ho2=>oh+c3h6+nc3h7hco 2.50E+12 1.0 25000.0
1394. c7h14-1+oh=ch2o+Ac6h13 1.00E+11 0.0 -4000.0
1395. c7h14-1+oh=ch3+c5h11hco 1.00E+11 0.0 -4000.0
1396. c7h14-2+oh=ch3hco+Ac5h11 1.40E+12 0.0 -900.0
1397. c7h14-2+oh=c2h5+nc4h9hco 1.40E+12 0.0 -900.0
1398. c7h14-3+oh=ethco+pc4h9 1.40E+12 0.0 -900.0
1399. c7h14-3+oh=nc3h7+nc3h7hco 1.40E+12 0.0 -900.0
1400. c7h14-1+o=ch2o+c6h12-1 3.40E+07 1.8 550.0
1401. c7h14-2+o=ch3hco+c5h10 3.40E+07 1.8 550.0
1402. c7h14-2+o=c2h4+nc4h9hco 3.40E+07 1.8 550.0
1403. c7h14-3+o=ethco+c4h8 3.40E+07 1.8 550.0
1404. c7h14-3+o=c3h6+nc3h7hco 3.40E+07 1.8 550.0
1405. c7h14-1+h=h2+Cc7h13-1 6.55E+12 0.0 4445.0
1406. c7h14-1+oh=h2o+Cc7h13-1 6.00E+13 0.0 1230.0
1407. c7h14-1+ho2=h2o2+Cc7h13-1 6.80E+03 2.5 10115.0
1408. c7h14-1+ch3=ch4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1409. c7h14-1+c2h3=c2h4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1410. c7h14-1+c2h5=c2h6+Cc7h13-1 1.00E+11 0.0 8300.0
1411. c7h14-1+o=oh+Cc7h13-1 4.00E+13 0.0 4000.0
1412. c7h14-2+h=h2+Cc7h13-1 6.55E+12 0.0 4445.0
1413. c7h14-2+oh=h2o+Cc7h13-1 6.00E+13 0.0 1230.0
1414. c7h14-2+ho2=h2o2+Cc7h13-1 1.02E+04 2.5 12340.5
1415. c7h14-2+ch3=ch4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1416. c7h14-2+c2h3=c2h4+Cc7h13-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1417. c7h14-2+c2h5=c2h6+Cc7h13-1 1.00E+11 0.0 8300.0
1418. c7h14-2+o=oh+Cc7h13-1 4.00E+13 0.0 4000.0
1419. c7h14-2+h=h2+Dc7h13-2 6.55E+12 0.0 4445.0
1420. c7h14-2+oh=h2o+Dc7h13-2 6.00E+13 0.0 1230.0
1421. c7h14-2+ho2=h2o2+Dc7h13-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1422. c7h14-2+ch3=ch4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
1423. c7h14-2+c2h3=c2h4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
1424. c7h14-2+c2h5=c2h6+Dc7h13-2 1.00E+11 0.0 8300.0
1425. c7h14-2+o=oh+Dc7h13-2 4.00E+13 0.0 4000.0
1426. c7h14-3+h=h2+Dc7h13-2 6.55E+12 0.0 4445.0
1427. c7h14-3+oh=h2o+Dc7h13-2 6.00E+13 0.0 1230.0
1428. c7h14-3+ho2=h2o2+Dc7h13-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1429. c7h14-3+ch3=ch4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
1430. c7h14-3+c2h3=c2h4+Dc7h13-2 2.00E+11 0.0 6800.0
1431. c7h14-3+c2h5=c2h6+Dc7h13-2 1.00E+11 0.0 8300.0
1432. c7h14-3+o=oh+Dc7h13-2 4.00E+13 0.0 4000.0
1433. c7h14-3+h=h2+Ec7h13-3 6.55E+12 0.0 4445.0
1434. c7h14-3+oh=h2o+Ec7h13-3 6.00E+13 0.0 1230.0

1435. c7h14-3+ho2=h2o2+Ec7h13-3 6.80E+03 2.5 10115.0
1436. c7h14-3+ch3=ch4+Ec7h13-3 2.00E+11 0.0 6800.0
1437. c7h14-3+c2h3=c2h4+Ec7h13-3 2.00E+11 0.0 6800.0
1438. c7h14-3+c2h5=c2h6+Ec7h13-3 1.00E+11 0.0 8300.0
1439. c7h14-3+o=oh+Ec7h13-3 4.00E+13 0.0 4000.0
1440. c7h14-1+oh=c7h14rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
1441. c7h14rohAB+o2=c7h14qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
1442. c7h14qjohAB=>oh+ch2o+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1443. c7h14-2+oh=c7h14rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
1444. c7h14rohBC+o2=c7h14qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
1445. c7h14qjohBC=>oh+ch3hco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1446. c7h14-3+oh=c7h14rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
1447. c7h14rohCD+o2=c7h14qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
1448. c7h14qjohCD=>oh+ethco+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1449. Cc7h13-1=c4h6+nc3h7 1.34E+15 -0.5 38320.0
1450. Dc7h13-2=c5h8-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
1451. Ec7h13-3=c6h10-13+ch3 2.50E+13 0.0 35000.0
1452. Cc7h13-1+ho2=>pc4h9+acrol+oh 1.00E+12 0.0 8000.0
1453. c6h13hco+h=h2+c6h13co 4.00E+13 0.0 4200.0
1454. c6h13hco+oh=h2o+c6h13co 4.20E+12 0.0 500.0
1455. c6h13hco+ho2=h2o2+c6h13co 1.00E+12 0.0 10000.0
1456. c6h13hco+ch3=ch4+c6h13co 2.00E-06 5.6 2500.0
1457. c6h13hco+c2h5=c2h6+c6h13co 1.30E+12 0.0 8500.0
1458. c6h13co+M=co+Ac6h13+M 8.64E+15 0.0 14400.0
1459. c6h13co+ho2=>co2+oh+Ac6h13 2.00E+13 0.0 0.0
1460. mhd=>Cc4h7-1+ac3h5 5.00E+15 0.0 72800.0
1461. mhd=>ch3+c6h9 5.00E+16 0.0 73000.0
1462. p2c4h614=p2c4h513+h 4.26E+13 0.0 38600.0
1463. p2c4h513=>isopy+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
1464. p2c4h513+h=P2c4h4134+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
1465. p2c4h513+oh=P2c4h4134+h2o 3.00E+12 0.0 1230.0
1466. p2c4h513+ho2=P2c4h4134+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
1467. p2c4h513+o2=P2c4h4134+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
1468. p2c4h513+ch3=P2c4h4134+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
1469. P2c4h4134=>c2h3+c5h8-12 1.00E+11 0.0 37000.0
1470. c5h8-12=>c3h3+c2h5 2.00E+15 0.0 75000.0
1471. c5h8-12=c5h8-13 2.50E+13 0.0 63000.0
1472. Ac7h13-3=c2h4+Ac5h9-1 1.00E+11 0.0 37000.0
1473. Ac7h13-3=c7h12-13+h 4.26E+13 0.0 38600.0
1474. Dc7h13-1=c2h3+c5h10 1.00E+11 0.0 37000.0
1475. Dc7h13-1=c7h12-13+h 4.26E+13 0.0 38600.0
1476. c7h12-16=ac3h5+Dc4h7-1 1.00E+16 0.0 71000.0
1477. c7h12-13=c5h7+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
1478. nc8h18=pc4h9+pc4h9 2.00E+17 0.0 83180.0
1479. nc8h18=nc3h7+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83400.0
1480. nc8h18=c2h5+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83680.0
1481. nc8h18=ch3+Ac7h15 2.00E+17 0.0 85570.0
1482. nc8h18=h+Ac8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
1483. nc8h18=h+Bc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
1484. nc8h18=h+Cc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
1485. nc8h18=h+Dc8h17 1.00E+15 0.0 100000.0
1486. nc8h18+o2=ho2+Ac8h17 4.00E+13 0.0 50870.0
1487. nc8h18+o2=ho2+Bc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
1488. nc8h18+o2=ho2+Cc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
1489. nc8h18+o2=ho2+Dc8h17 8.00E+13 0.0 47690.0
1490. nc8h18+oh=h2o+Ac8h17 1.05E+10 1.0 1590.0
1491. nc8h18+oh=h2o+Bc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
1492. nc8h18+oh=h2o+Cc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
1493. nc8h18+oh=h2o+Dc8h17 9.36E+07 1.6 -35.0
1494. nc8h18+ho2=h2o2+Ac8h17 3.60E+04 2.5 16683.0
1495. nc8h18+ho2=h2o2+Bc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0

1496. nc8h18+ho2=h2o2+Cc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0
1497. nc8h18+ho2=h2o2+Dc8h17 4.00E+04 2.5 14208.0
1498. nc8h18+h=h2+Ac8h17 5.70E+07 2.0 7700.0
1499. nc8h18+h=h2+Bc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
1500. nc8h18+h=h2+Cc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
1501. nc8h18+h=h2+Dc8h17 1.80E+07 2.0 5000.0
1502. o+nc8h18=oh+Ac8h17 1.00E+14 0.0 7850.0
1503. o+nc8h18=oh+Bc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
1504. o+nc8h18=oh+Cc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
1505. o+nc8h18=oh+Dc8h17 5.20E+13 0.0 5200.0
1506. nc8h18+ch3=ch4+Ac8h17 6.00E-01 4.0 8200.0
1507. nc8h18+ch3=ch4+Bc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
1508. nc8h18+ch3=ch4+Cc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
1509. nc8h18+ch3=ch4+Dc8h17 4.00E+11 0.0 9600.0
1510. nc8h18+c2h5=c2h6+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13500.0
1511. nc8h18+c2h5=c2h6+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
1512. nc8h18+c2h5=c2h6+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
1513. nc8h18+c2h5=c2h6+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11000.0
1514. nc8h18+hco=ch2o+Ac8h17 2.00E+05 2.5 18500.0
1515. nc8h18+hco=ch2o+Bc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
1516. nc8h18+hco=ch2o+Cc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
1517. nc8h18+hco=ch2o+Dc8h17 2.20E+07 1.9 17000.0
1518. nc8h18+ch3o=ch3oh+Ac8h17 3.20E+11 0.0 7300.0
1519. nc8h18+ch3o=ch3oh+Bc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
1520. nc8h18+ch3o=ch3oh+Cc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
1521. nc8h18+ch3o=ch3oh+Dc8h17 2.90E+11 0.0 4500.0
1522. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Ac8h17 2.00E+02 3.0 14000.0
1523. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Bc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
1524. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Cc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
1525. nc8h18+ch2oh=ch3oh+Dc8h17 1.20E+02 3.0 12000.0
1526. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Ac8h17 1.20E+13 0.0 20000.0
1527. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Bc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
1528. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Cc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
1529. nc8h18+ch3o2=ch3o2h+Dc8h17 6.00E+12 0.0 17500.0
1530. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
1531. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1532. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1533. nc8h18+ch2hco=ch3hco+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1534. nc8h18+ch3co=ch3hco+Ac8h17 3.00E+11 0.0 15000.0
1535. nc8h18+ch3co=ch3hco+Bc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
1536. nc8h18+ch3co=ch3hco+Cc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
1537. nc8h18+ch3co=ch3hco+Dc8h17 2.00E+11 0.0 12700.0
1538. nc8h18+nc3h7=c3h8+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
1539. nc8h18+nc3h7=c3h8+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1540. nc8h18+nc3h7=c3h8+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1541. nc8h18+nc3h7=c3h8+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1542. nc8h18+pc4h9=c4h10+Ac8h17 6.00E+11 0.0 13700.0
1543. nc8h18+pc4h9=c4h10+Bc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1544. nc8h18+pc4h9=c4h10+Cc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1545. nc8h18+pc4h9=c4h10+Dc8h17 4.00E+11 0.0 11400.0
1546. nc8h18+ac3h5=c3h6+Ac8h17 1.20E+02 3.3 19840.0
1547. nc8h18+ac3h5=c3h6+Bc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
1548. nc8h18+ac3h5=c3h6+Cc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
1549. nc8h18+ac3h5=c3h6+Dc8h17 8.00E+01 3.3 18170.0
1550. Ac8h17=Ac6h13+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
1551. Bc8h17=Ac5h11+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
1552. Cc8h17=pc4h9+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5
1553. Cc8h17=ch3+c7h14-1 9.55E+09 1.1 29390.7
1554. Dc8h17=nc3h7+c5h10 5.50E+11 0.6 28087.1
1555. Dc8h17=c2h5+c6h12-1 8.51E+09 1.1 27025.9
1556. Ac8h17=h+c8h16-1 1.24E+18 -1.5 37436.0

1557. Dc8h17=h+c8h16-3 9.80E+14 -0.7 35922.0
1558. Dc8h17=h+c8h16-4 5.14E+14 -0.7 35928.0
1559. Cc8h17=h+c8h16-3 9.80E+14 -0.7 35922.0
1560. Cc8h17=h+c8h16-2 1.46E+15 -0.7 36050.0
1561. Bc8h17=h+c8h16-2 2.16E+15 -0.7 36144.0
1562. Bc8h17=h+c8h16-1 1.79E+18 -1.4 38332.0
1563. Ac8h17+o2=c8h16-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
1564. Bc8h17+o2=c8h16-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
1565. Bc8h17+o2=c8h16-1+ho2 8.00E+09 0.0 -2000.0
1566. Cc8h17+o2=c8h16-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1567. Cc8h17+o2=c8h16-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1568. Dc8h17+o2=c8h16-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1569. Dc8h17+o2=c8h16-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1570. Ac8h17=Cc8h17 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.31E+00 3.1 13074.0
1571. Ac8h17=Dc8h17 6.52E-03 4.0 9665.0
Reverse Arrhenius coefficients: 5.30E-04 4.3 11757.0
1572. Bc8h17=Cc8h17 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+01 3.0 13165.0
1573. Bc8h17=Dc8h17 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.18E+00 3.3 16152.0
1574. c8h16-1=ac3h5+Ac5h11 2.50E+16 0.0 70000.0
1575. c8h16-1=Dc4h7-1+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
1576. c8h16-1=Ec5h9-1+nc3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
1577. c8h16-1=Fc6h11-1+c2h5 1.00E+16 0.0 71000.0
1578. Cc8h15-1+h=c8h16-1 1.00E+13 0.0 0.0
1579. Dc8h15-2+h=c8h16-2 1.00E+13 0.0 0.0
1580. Ec8h15-3+h=c8h16-3 1.00E+13 0.0 0.0
1581. Ec8h15-3+h=c8h16-4 1.00E+13 0.0 0.0
1582. c8h16-1+ho2=>oh+ch2o+c7h14-1 2.50E+12 1.0 25000.0
1583. c8h16-2+ho2=>oh+ch3hco+c6h12-1 2.50E+12 1.0 25000.0
1584. c8h16-2+ho2=>oh+c2h4+c5h11hco 2.50E+12 1.0 25000.0
1585. c8h16-3+ho2=>oh+ethco+c5h10 2.50E+12 1.0 25000.0
1586. c8h16-3+ho2=>oh+c3h6+nc4h9hco 2.50E+12 1.0 25000.0
1587. c8h16-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c4h8 5.00E+12 1.0 25000.0
1588. c8h16-1+ch3=Ac6h13+c3h6 9.60E+10 0.0 8000.0
1589. c8h16-1+oh=ch2o+Ac7h15 1.40E+12 0.0 -900.0
1590. c8h16-1+oh=ch3+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
1591. c8h16-2+oh=ch3hco+Ac6h13 1.40E+12 0.0 -900.0
1592. c8h16-2+oh=c2h5+c5h11hco 1.40E+12 0.0 -900.0
1593. c8h16-3+oh=ethco+Ac5h11 1.40E+12 0.0 -900.0
1594. c8h16-3+oh=nc3h7+nc4h9hco 1.40E+12 0.0 -900.0
1595. c8h16-4+oh=nc3h7hco+pc4h9 2.80E+12 0.0 -900.0
1596. c8h16-1+o=ch2o+c7h14-1 1.00E+11 0.0 -1050.0
1597. c8h16-2+o=ch3hco+c6h12-1 1.00E+11 0.0 -1050.0
1598. c8h16-2+o=c2h4+c5h11hco 1.00E+11 0.0 -1050.0
1599. c8h16-3+o=ethco+c5h10 1.00E+11 0.0 -1050.0
1600. c8h16-3+o=c3h6+nc4h9hco 1.00E+11 0.0 -1050.0
1601. c8h16-4+o=nc3h7hco+c4h8 2.00E+11 0.0 -1050.0
1602. c8h16-1+h=h2+Cc8h15-1 6.55E+12 0.0 4445.0
1603. c8h16-1+oh=h2o+Cc8h15-1 6.00E+13 0.0 1230.0
1604. c8h16-1+ho2=h2o2+Cc8h15-1 6.80E+03 2.5 10115.0
1605. c8h16-1+ch3=ch4+Cc8h15-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1606. c8h16-1+ch3o2=ch3o2h+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1607. c8h16-1+c2h5=c2h6+Cc8h15-1 1.00E+11 0.0 8300.0
1608. c8h16-1+o=oh+Cc8h15-1 4.00E+13 0.0 4000.0
1609. c8h16-1+nc3h7=c3h8+Cc8h15-1 1.00E+11 0.0 8300.0
1610. c8h16-1+c2h3=c2h4+Cc8h15-1 2.00E+11 0.0 6800.0
1611. c8h16-2+h=h2+Cc8h15-1 1.70E+05 2.5 2490.0
1612. c8h16-2+oh=h2o+Cc8h15-1 3.10E+06 2.0 -300.0
1613. c8h16-2+ho2=h2o2+Cc8h15-1 1.02E+04 2.5 12340.5

1614. c8h16-2+ch3=ch4+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1615. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1616. c8h16-2+c2h5=c2h6+Cc8h15-1 2.20E+00 3.5 6835.0
1617. c8h16-2+o=oh+Cc8h15-1 6.00E+10 0.7 7682.0
1618. c8h16-2+h=h2+Dc8h15-2 1.70E+05 2.5 2490.0
1619. c8h16-2+oh=h2o+Dc8h15-2 3.10E+06 2.0 -300.0
1620. c8h16-2+ho2=h2o2+Dc8h15-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1621. c8h16-2+ch3=ch4+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1622. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1623. c8h16-2+c2h5=c2h6+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 6835.0
1624. c8h16-2+o=oh+Dc8h15-2 6.00E+10 0.7 7682.0
1625. c8h16-3+h=h2+Dc8h15-2 1.70E+05 2.5 2490.0
1626. c8h16-3+oh=h2o+Dc8h15-2 3.10E+06 2.0 -300.0
1627. c8h16-3+ho2=h2o2+Dc8h15-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1628. c8h16-3+ch3=ch4+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1629. c8h16-3+ch3o2=ch3o2h+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1630. c8h16-3+c2h5=c2h6+Dc8h15-2 2.20E+00 3.5 6835.0
1631. c8h16-3+o=oh+Dc8h15-2 6.00E+10 0.7 7682.0
1632. c8h16-3+h=h2+Ec8h15-3 1.70E+05 2.5 2490.0
1633. c8h16-3+oh=h2o+Ec8h15-3 3.10E+06 2.0 -300.0
1634. c8h16-3+ho2=h2o2+Ec8h15-3 6.80E+03 2.5 10115.0
1635. c8h16-3+ch3=ch4+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1636. c8h16-3+ch3o2=ch3o2h+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1637. c8h16-3+c2h5=c2h6+Ec8h15-3 2.20E+00 3.5 6835.0
1638. c8h16-3+o=oh+Ec8h15-3 6.00E+10 0.7 7682.0
1639. c8h16-4+h=h2+Ec8h15-3 3.40E+05 2.5 2490.0
1640. c8h16-4+oh=h2o+Ec8h15-3 6.20E+06 2.0 -300.0
1641. c8h16-4+ho2=h2o2+Ec8h15-3 1.34E+04 2.5 10115.0
1642. c8h16-4+ch3=ch4+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 5675.0
1643. c8h16-4+ch3o2=ch3o2h+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 5675.0
1644. c8h16-4+c2h5=c2h6+Ec8h15-3 4.40E+00 3.5 6835.0
1645. c8h16-4+o=oh+Ec8h15-3 1.20E+11 0.7 7682.0
1646. Cc8h15-1=c4h6+pc4h9 1.34E+15 -0.5 38320.0
1647. Cc8h15-1+ho2=>oh+acrol+Ac5h11 1.00E+12 0.0 8000.0
1648. Dc8h15-2=c5h8-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
1649. Ec8h15-3=c6h10-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
1650. c8h16-1+oh=c8h16rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
1651. c8h16rohAB+o2=c8h16qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
1652. c8h16qjohAB=>oh+ch2o+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1653. c8h16-2+oh=c8h16rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
1654. c8h16rohBC+o2=c8h16qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
1655. c8h16qjohBC=>oh+ch3hco+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1656. c8h16-3+oh=c8h16rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
1657. c8h16rohCD+o2=c8h16qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
1658. c8h16qjohCD=>oh+ethco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1659. c8h16-4+oh=c8h16rohDE 2.76E+12 0.0 -1042.0
1660. c8h16rohDE+o2=c8h16qjohDE 1.00E+12 0.0 -1100.0
1661. c8h16qjohDE=>oh+nc3h7hco+nc3h7hco 1.00E+12 0.0 28680.0
1662. ac3h5+Ec5h9-1=c8h14 1.00E+13 0.0 0.0
1663. Dc4h7-1+Dc4h7-1=c8h14 1.00E+13 0.0 0.0
1664. c7h15hco+h=h2+c7h15co 4.00E+13 0.0 4200.0
1665. c7h15hco+oh=h2o+c7h15co 4.20E+12 0.0 500.0
1666. c7h15hco+ho2=h2o2+c7h15co 1.00E+12 0.0 10000.0
1667. c7h15hco+ch3=ch4+c7h15co 2.00E-06 5.6 2500.0
1668. c7h15hco+c2h5=c2h6+c7h15co 1.30E+12 0.0 8500.0
1669. c7h15co+M=co+Ac7h15+M 8.64E+15 0.0 14400.0
1670. c7h15co+ho2=>co2+oh+Ac7h15 2.00E+13 0.0 0.0
1671. Hc8h15-1=Fc6h11-1+c2h4 2.00E+13 0.0 29400.0
1672. nc9h20=pc4h9+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83180.0
1673. nc9h20=nc3h7+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83400.0
1674. nc9h20=c2h5+Ac7h15 2.00E+17 0.0 83680.0

1675. nc9h20=ch3+Ac8h17 2.00E+17 0.0 85570.0
1676. nc9h20=h+Ac9h19 9.61E+14 0.5 97289.0
1677. nc9h20=h+Bc9h19 1.07E+12 1.3 96900.0
1678. nc9h20=h+Cc9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
1679. nc9h20=h+Dc9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
1680. nc9h20=h+Ec9h19 1.55E+12 1.2 96992.0
1681. nc9h20+o2=ho2+Ac9h19 4.00E+13 0.0 50870.0
1682. nc9h20+o2=ho2+Bc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
1683. nc9h20+o2=ho2+Cc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
1684. nc9h20+o2=ho2+Dc9h19 8.00E+13 0.0 47690.0
1685. nc9h20+o2=ho2+Ec9h19 4.00E+13 0.0 47690.0
1686. nc9h20+oh=h2o+Ac9h19 1.05E+10 1.0 1590.0
1687. nc9h20+oh=h2o+Bc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
1688. nc9h20+oh=h2o+Cc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
1689. nc9h20+oh=h2o+Dc9h19 9.36E+07 1.6 -35.0
1690. nc9h20+oh=h2o+Ec9h19 4.68E+07 1.6 -35.0
1691. nc9h20+ho2=h2o2+Ac9h19 3.60E+04 2.5 16683.0
1692. nc9h20+ho2=h2o2+Bc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
1693. nc9h20+ho2=h2o2+Cc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
1694. nc9h20+ho2=h2o2+Dc9h19 4.00E+04 2.5 14208.0
1695. nc9h20+ho2=h2o2+Ec9h19 2.00E+04 2.5 14208.0
1696. nc9h20+h=h2+Ac9h19 5.70E+07 2.0 7700.0
1697. nc9h20+h=h2+Bc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
1698. nc9h20+h=h2+Cc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
1699. nc9h20+h=h2+Dc9h19 1.80E+07 2.0 5000.0
1700. nc9h20+h=h2+Ec9h19 9.00E+06 2.0 5000.0
1701. o+nc9h20=oh+Ac9h19 1.00E+14 0.0 7850.0
1702. o+nc9h20=oh+Bc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
1703. o+nc9h20=oh+Cc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
1704. o+nc9h20=oh+Dc9h19 5.20E+13 0.0 5200.0
1705. o+nc9h20=oh+Ec9h19 2.60E+13 0.0 5200.0
1706. nc9h20+ch3=ch4+Ac9h19 6.00E-01 4.0 8200.0
1707. nc9h20+ch3=ch4+Bc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
1708. nc9h20+ch3=ch4+Cc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
1709. nc9h20+ch3=ch4+Dc9h19 4.00E+11 0.0 9600.0
1710. nc9h20+ch3=ch4+Ec9h19 2.00E+11 0.0 9600.0
1711. nc9h20+c2h5=c2h6+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13500.0
1712. nc9h20+c2h5=c2h6+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
1713. nc9h20+c2h5=c2h6+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
1714. nc9h20+c2h5=c2h6+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11000.0
1715. nc9h20+c2h5=c2h6+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11000.0
1716. nc9h20+hco=ch2o+Ac9h19 2.00E+05 2.5 18500.0
1717. nc9h20+hco=ch2o+Bc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
1718. nc9h20+hco=ch2o+Cc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
1719. nc9h20+hco=ch2o+Dc9h19 2.20E+07 1.9 17000.0
1720. nc9h20+hco=ch2o+Ec9h19 1.10E+07 1.9 17000.0
1721. nc9h20+ch3o=ch3oh+Ac9h19 3.20E+11 0.0 7300.0
1722. nc9h20+ch3o=ch3oh+Bc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
1723. nc9h20+ch3o=ch3oh+Cc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
1724. nc9h20+ch3o=ch3oh+Dc9h19 2.90E+11 0.0 4500.0
1725. nc9h20+ch3o=ch3oh+Ec9h19 1.45E+11 0.0 4500.0
1726. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ac9h19 2.00E+02 3.0 14000.0
1727. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Bc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
1728. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Cc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
1729. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Dc9h19 1.20E+02 3.0 12000.0
1730. nc9h20+ch2oh=ch3oh+Ec9h19 6.00E+01 3.0 12000.0
1731. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ac9h19 1.20E+13 0.0 20000.0
1732. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Bc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
1733. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Cc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
1734. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Dc9h19 6.00E+12 0.0 17500.0
1735. nc9h20+ch3o2=ch3o2h+Ec9h19 3.00E+12 0.0 17500.0

1736. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1737. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1738. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1739. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1740. nc9h20+ch2hco=ch3hco+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1741. nc9h20+ch3co=ch3hco+Ac9h19 3.00E+11 0.0 15000.0
1742. nc9h20+ch3co=ch3hco+Bc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
1743. nc9h20+ch3co=ch3hco+Cc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
1744. nc9h20+ch3co=ch3hco+Dc9h19 2.00E+11 0.0 12700.0
1745. nc9h20+ch3co=ch3hco+Ec9h19 1.00E+11 0.0 12700.0
1746. nc9h20+nc3h7=c3h8+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1747. nc9h20+nc3h7=c3h8+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1748. nc9h20+nc3h7=c3h8+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1749. nc9h20+nc3h7=c3h8+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1750. nc9h20+nc3h7=c3h8+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1751. nc9h20+pc4h9=c4h10+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1752. nc9h20+pc4h9=c4h10+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1753. nc9h20+pc4h9=c4h10+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1754. nc9h20+pc4h9=c4h10+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1755. nc9h20+pc4h9=c4h10+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1756. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1757. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1758. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1759. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1760. nc9h20+Ac5h11=nc5h12+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1761. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1762. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1763. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1764. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1765. nc9h20+Ac6h13=c6h14+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1766. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1767. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1768. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1769. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1770. nc9h20+Ac7h15=nc7h16+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1771. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ac9h19 6.00E+11 0.0 13700.0
1772. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1773. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1774. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1775. nc9h20+Ac8h17=nc8h18+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1776. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Bc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1777. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Cc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1778. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 11400.0
1779. nc9h20+Ac9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 11400.0
1780. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Cc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
1781. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
1782. nc9h20+Bc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
1783. nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Dc9h19 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
1784. nc9h20+Cc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
1785. nc9h20+Dc9h19=nc9h20+Ec9h19 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
1786. nc9h20+o2cho=Ac9h19+ho2cho 1.68E+13 0.0 20440.0
1787. nc9h20+o2cho=Bc9h19+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
1788. nc9h20+o2cho=Cc9h19+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
1789. nc9h20+o2cho=Dc9h19+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
1790. nc9h20+o2cho=Ec9h19+ho2cho 5.60E+12 0.0 17690.0
1791. Ac9h19=Ac7h15+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
1792. Bc9h19=Ac6h13+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
1793. Cc9h19=Ac5h11+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5

1794. Cc9h19=ch3+c8h16-1 9.55E+09 1.1 29390.7
1795. Dc9h19=pc4h9+c5h10 2.04E+13 0.0 28496.5
1796. Dc9h19=c2h5+c7h14-1 8.51E+09 1.1 27025.9
1797. Ec9h19=nc3h7+c6h12-1 5.50E+11 0.6 28087.1
1798. Ac9h19=h+c9h18-1 1.28E+12 0.2 38372.0
1799. Bc9h19=h+c9h18-1 1.95E+15 -0.6 37371.0
1800. Bc9h19=h+c9h18-2 2.74E+15 -0.7 36120.0
1801. Cc9h19=h+c9h18-2 1.90E+15 -0.7 36028.0
1802. Cc9h19=h+c9h18-3 1.08E+15 -0.7 35875.0
1803. Dc9h19=h+c9h18-3 1.08E+15 -0.7 35875.0
1804. Dc9h19=h+c9h18-4 1.08E+15 -0.7 35875.0
1805. Ec9h19=h+c9h18-4 2.11E+15 -0.6 35872.0
1806. Ac9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
1807. Bc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
1808. Bc9h19+o2=c9h18-1+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1809. Cc9h19+o2=c9h18-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1810. Cc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1811. Dc9h19+o2=c9h18-3+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1812. Dc9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1813. Ec9h19+o2=c9h18-4+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
1814. Ac9h19=Dc9h19 6.38E-04 4.3 9944.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.08E-03 4.1 12085.0
1815. Ac9h19=Ec9h19 2.29E+01 2.8 10757.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.72E+00 3.2 12849.0
1816. Bc9h19=Cc9h19 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.95E+00 3.1 11017.0
1817. Bc9h19=Dc9h19 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.86E+00 3.3 13199.0
1818. Bc9h19=Ec9h19 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.82E+00 3.3 16146.0
1819. Cc9h19=Dc9h19 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.41E+00 3.3 16146.0
1820. c9h18-1+ch3=Ac7h15+c3h6 9.60E+10 0.0 8000.0
1821. c9h18-1+oh=ch3+c7h15hco 1.00E+12 0.0 0.0
1822. c9h18-1+oh=ch2o+Ac8h17 1.00E+12 0.0 0.0
1823. c9h18-2+oh=c2h5+c6h13hco 1.00E+12 0.0 0.0
1824. c9h18-2+oh=ch3hco+Ac7h15 1.00E+12 0.0 0.0
1825. c9h18-3+oh=nc3h7+c5h11hco 1.00E+12 0.0 0.0
1826. c9h18-3+oh=ethco+Ac6h13 1.00E+12 0.0 0.0
1827. c9h18-4+oh=pc4h9+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 0.0
1828. c9h18-4+oh=nc3h7hco+Ac5h11 1.00E+12 0.0 0.0
1829. c9h18-1+o=ch2o+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
1830. c9h18-2+o=ch3hco+c7h14-1 3.40E+07 1.8 550.0
1831. c9h18-2+o=c2h4+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
1832. c9h18-3+o=ethco+c6h12-1 3.40E+07 1.8 550.0
1833. c9h18-3+o=c3h6+c5h11hco 3.40E+07 1.8 550.0
1834. c9h18-4+o=nc3h7hco+c5h10 3.40E+07 1.8 550.0
1835. c9h18-4+o=c4h8+nc4h9hco 3.40E+07 1.8 550.0
1836. c9h18-1+h=h2+Cc9h17-1 1.70E+05 2.5 2490.0
1837. c9h18-1+oh=h2o+Cc9h17-1 3.10E+06 2.0 -300.0
1838. c9h18-1+ho2=h2o2+Cc9h17-1 6.80E+03 2.5 10115.0
1839. c9h18-1+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1840. c9h18-1+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1841. c9h18-1+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 6835.0
1842. c9h18-1+o=oh+Cc9h17-1 6.00E+10 0.7 7682.0
1843. c9h18-2+h=h2+Cc9h17-1 1.70E+05 2.5 2490.0
1844. c9h18-2+oh=h2o+Cc9h17-1 3.10E+06 2.0 -300.0
1845. c9h18-2+ho2=h2o2+Cc9h17-1 1.02E+04 2.5 12340.5
1846. c9h18-2+ch3=ch4+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1847. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 5675.0
1848. c9h18-2+c2h5=c2h6+Cc9h17-1 2.20E+00 3.5 6835.0

1849. c9h18-2+o=oh+Cc9h17-1 6.00E+10 0.7 7682.0
1850. c9h18-2+h=h2+Dc9h17-2 1.70E+05 2.5 2490.0
1851. c9h18-2+oh=h2o+Dc9h17-2 3.10E+06 2.0 -300.0
1852. c9h18-2+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1853. c9h18-2+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1854. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1855. c9h18-2+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 6835.0
1856. c9h18-2+o=oh+Dc9h17-2 6.00E+10 0.7 7682.0
1857. c9h18-3+h=h2+Dc9h17-2 1.70E+05 2.5 2490.0
1858. c9h18-3+oh=h2o+Dc9h17-2 3.10E+06 2.0 -300.0
1859. c9h18-3+ho2=h2o2+Dc9h17-2 6.80E+03 2.5 10115.0
1860. c9h18-3+ch3=ch4+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1861. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 5675.0
1862. c9h18-3+c2h5=c2h6+Dc9h17-2 2.20E+00 3.5 6835.0
1863. c9h18-3+o=oh+Dc9h17-2 6.00E+10 0.7 7682.0
1864. c9h18-3+h=h2+Ec9h17-3 1.70E+05 2.5 2490.0
1865. c9h18-3+oh=h2o+Ec9h17-3 3.10E+06 2.0 -300.0
1866. c9h18-3+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.80E+03 2.5 10115.0
1867. c9h18-3+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1868. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1869. c9h18-3+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 6835.0
1870. c9h18-3+o=oh+Ec9h17-3 6.00E+10 0.7 7682.0
1871. c9h18-4+h=h2+Ec9h17-3 1.70E+05 2.5 2490.0
1872. c9h18-4+oh=h2o+Ec9h17-3 3.10E+06 2.0 -300.0
1873. c9h18-4+ho2=h2o2+Ec9h17-3 6.80E+03 2.5 10115.0
1874. c9h18-4+ch3=ch4+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1875. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 5675.0
1876. c9h18-4+c2h5=c2h6+Ec9h17-3 2.20E+00 3.5 6835.0
1877. c9h18-4+o=oh+Ec9h17-3 6.00E+10 0.7 7682.0
1878. c9h18-4+h=h2+Fc9h17-4 1.70E+05 2.5 2490.0
1879. c9h18-4+oh=h2o+Fc9h17-4 3.10E+06 2.0 -300.0
1880. c9h18-4+ho2=h2o2+Fc9h17-4 6.80E+03 2.5 10115.0
1881. c9h18-4+ch3=ch4+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 5675.0
1882. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 5675.0
1883. c9h18-4+c2h5=c2h6+Fc9h17-4 2.20E+00 3.5 6835.0
1884. c9h18-4+o=oh+Fc9h17-4 6.00E+10 0.7 7682.0
1885. Cc9h17-1=c4h6+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
1886. Cc9h17-1+h=c9h18-1 1.00E+13 0.0 0.0
1887. Cc9h17-1+ho2=oh+acrol+Ac6h13 1.00E+12 0.0 8000.0
1888. Dc9h17-2=c5h8-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
1889. Ec9h17-3=c6h10-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
1890. Fc9h17-4=c7h12-13+c2h5 2.50E+13 0.0 35000.0
1891. Dc4h7-1+Ec5h9-1=c9h16 1.00E+13 0.0 0.0
1892. c8h17hco+h=h2+c8h17co 4.00E+13 0.0 4200.0
1893. c8h17hco+oh=h2o+c8h17co 4.20E+12 0.0 500.0
1894. c8h17hco+ho2=h2o2+c8h17co 1.00E+12 0.0 10000.0
1895. c8h17hco+ch3=ch4+c8h17co 2.00E-06 5.6 2500.0
1896. c8h17hco+c2h5=c2h6+c8h17co 1.30E+12 0.0 8500.0
1897. c8h17co=>co+Ac8h17 2.00E+13 0.0 28700.0
1898. c8h17co+ho2=>co2+oh+Ac8h17 2.00E+13 0.0 0.0
1899. nc10h22=Ac5h11+Ac5h11 2.00E+17 0.0 83180.0
1900. nc10h22=pc4h9+Ac6h13 2.00E+17 0.0 83180.0
1901. nc10h22=nc3h7+Ac7h15 2.00E+17 0.0 83400.0
1902. nc10h22=c2h5+Ac8h17 2.00E+17 0.0 83680.0
1903. nc10h22=ch3+Ac9h19 2.00E+17 0.0 85570.0
1904. nc10h22+h=Ac10h21 1.10E+14 0.8 96940.0
1905. nc10h22+h=Bc10h21 3.41E+15 0.3 97203.0
1906. nc10h22+h=Cc10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
1907. nc10h22+h=Dc10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
1908. nc10h22+h=Ec10h21 3.75E+15 0.3 97191.0
1909. nc10h22+o2=ho2+Ac10h21 4.00E+13 0.0 50870.0

1910. nc10h22+o2=ho2+Bc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
1911. nc10h22+o2=ho2+Cc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
1912. nc10h22+o2=ho2+Dc10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
1913. nc10h22+o2=ho2+Ec10h21 8.00E+13 0.0 47690.0
1914. nc10h22+oh=h2o+Ac10h21 1.05E+10 1.0 1590.0
1915. nc10h22+oh=h2o+Bc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
1916. nc10h22+oh=h2o+Cc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
1917. nc10h22+oh=h2o+Dc10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
1918. nc10h22+oh=h2o+Ec10h21 9.36E+07 1.6 -35.0
1919. nc10h22+ho2=h2o2+Ac10h21 3.60E+04 2.5 16683.0
1920. nc10h22+ho2=h2o2+Bc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
1921. nc10h22+ho2=h2o2+Cc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
1922. nc10h22+ho2=h2o2+Dc10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
1923. nc10h22+ho2=h2o2+Ec10h21 4.00E+04 2.5 14208.0
1924. nc10h22+h=h2+Ac10h21 5.70E+07 2.0 7700.0
1925. nc10h22+h=h2+Bc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
1926. nc10h22+h=h2+Cc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
1927. nc10h22+h=h2+Dc10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
1928. nc10h22+h=h2+Ec10h21 1.80E+07 2.0 5000.0
1929. o+nc10h22=oh+Ac10h21 1.00E+14 0.0 7850.0
1930. o+nc10h22=oh+Bc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
1931. o+nc10h22=oh+Cc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
1932. o+nc10h22=oh+Dc10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
1933. o+nc10h22=oh+Ec10h21 5.20E+13 0.0 5200.0
1934. nc10h22+ch3=ch4+Ac10h21 6.00E-01 4.0 8200.0
1935. nc10h22+ch3=ch4+Bc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
1936. nc10h22+ch3=ch4+Cc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
1937. nc10h22+ch3=ch4+Dc10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
1938. nc10h22+ch3=ch4+Ec10h21 4.00E+11 0.0 9600.0
1939. nc10h22+c2h5=c2h6+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13500.0
1940. nc10h22+c2h5=c2h6+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
1941. nc10h22+c2h5=c2h6+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
1942. nc10h22+c2h5=c2h6+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
1943. nc10h22+c2h5=c2h6+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11000.0
1944. nc10h22+hco=ch2o+Ac10h21 2.00E+05 2.5 18500.0
1945. nc10h22+hco=ch2o+Bc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
1946. nc10h22+hco=ch2o+Cc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
1947. nc10h22+hco=ch2o+Dc10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
1948. nc10h22+hco=ch2o+Ec10h21 2.20E+07 1.9 17000.0
1949. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ac10h21 3.20E+11 0.0 7300.0
1950. nc10h22+ch3o=ch3oh+Bc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
1951. nc10h22+ch3o=ch3oh+Cc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
1952. nc10h22+ch3o=ch3oh+Dc10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
1953. nc10h22+ch3o=ch3oh+Ec10h21 2.90E+11 0.0 4500.0
1954. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ac10h21 2.00E+02 3.0 14000.0
1955. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Bc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
1956. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Cc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
1957. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Dc10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
1958. nc10h22+ch2oh=ch3oh+Ec10h21 1.20E+02 3.0 12000.0
1959. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
1960. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
1961. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
1962. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
1963. nc10h22+ch3o2=ch3o2h+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
1964. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1965. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1966. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1967. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1968. nc10h22+ch2hco=ch3hco+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1969. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ac10h21 3.00E+11 0.0 15000.0
1970. nc10h22+ch3co=ch3hco+Bc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0

1971. nc10h22+ch3co=ch3hco+Cc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
1972. nc10h22+ch3co=ch3hco+Dc10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
1973. nc10h22+ch3co=ch3hco+Ec10h21 2.00E+11 0.0 12700.0
1974. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1975. nc10h22+nc3h7=c3h8+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1976. nc10h22+nc3h7=c3h8+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1977. nc10h22+nc3h7=c3h8+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1978. nc10h22+nc3h7=c3h8+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1979. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1980. nc10h22+pc4h9=c4h10+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1981. nc10h22+pc4h9=c4h10+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1982. nc10h22+pc4h9=c4h10+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1983. nc10h22+pc4h9=c4h10+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1984. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1985. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1986. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1987. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1988. nc10h22+Ac5h11=nc5h12+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1989. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1990. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1991. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1992. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1993. nc10h22+Ac6h13=c6h14+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1994. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
1995. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1996. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1997. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1998. nc10h22+Ac7h15=nc7h16+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
1999. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2000. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2001. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2002. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2003. nc10h22+Ac8h17=nc8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2004. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
2005. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2006. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2007. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2008. nc10h22+Ac9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2009. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2010. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2011. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2012. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2013. nc10h22+Bc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2014. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2015. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2016. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2017. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2018. nc10h22+Cc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2019. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2020. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2021. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2022. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2023. nc10h22+Dc9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2024. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ac10h21 6.00E+11 0.0 14700.0
2025. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Bc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2026. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2027. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2028. nc10h22+Ec9h19=nc9h20+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2029. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2030. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2031. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0

2032. nc10h22+Ac10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
2033. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Cc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2034. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2035. nc10h22+Bc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
2036. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Dc10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2037. nc10h22+Cc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2038. nc10h22+Dc10h21=nc10h22+Ec10h21 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
2039. nc10h22+o2cho=Ac10h21+ho2cho 1.68E+13 0.0 20440.0
2040. nc10h22+o2cho=Bc10h21+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
2041. nc10h22+o2cho=Cc10h21+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
2042. nc10h22+o2cho=Dc10h21+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
2043. nc10h22+o2cho=Ec10h21+ho2cho 1.12E+13 0.0 17690.0
2044. Ac10h21=Ac8h17+c2h4 9.12E+11 0.3 27240.5
2045. Bc10h21=Ac7h15+c3h6 6.02E+10 0.8 27822.8
2046. Cc10h21=Ac6h13+c4h8 2.04E+13 0.0 28496.5
2047. Cc10h21=ch3+c9h18-1 9.55E+09 1.1 29390.7
2048. Dc10h21=Ac5h11+c5h10 2.04E+13 0.0 28496.5
2049. Dc10h21=c2h5+c8h16-1 8.51E+09 1.1 27025.9
2050. Ec10h21=pc4h9+c6h12-1 2.04E+13 0.0 28496.5
2051. Ec10h21=nc3h7+c7h14-1 5.50E+11 0.6 28087.1
2052. Ac10h21=h+c10h20-1 1.99E+13 0.0 35861.0
2053. Bc10h21=h+c10h20-1 7.73E+12 0.2 36548.0
2054. Bc10h21=h+c10h20-2 1.08E+13 0.0 35288.0
2055. Cc10h21=h+c10h20-2 7.47E+12 0.0 35206.0
2056. Cc10h21=h+c10h20-3 4.03E+12 0.1 35036.0
2057. Dc10h21=h+c10h20-3 4.03E+12 0.1 35039.0
2058. Dc10h21=h+c10h20-4 4.02E+12 0.1 35037.0
2059. Ec10h21=h+c10h20-4 4.02E+12 0.1 35037.0
2060. Ec10h21=h+c10h20-5 2.19E+12 0.1 35055.0
2061. Ac10h21+o2=c10h20-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2062. Bc10h21+o2=c10h20-1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2063. Bc10h21+o2=c10h20-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2064. Cc10h21+o2=c10h20-2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2065. Cc10h21+o2=c10h20-3+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2066. Dc10h21+o2=c10h20-3+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2067. Dc10h21+o2=c10h20-4+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2068. Ec10h21+o2=c10h20-4+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2069. Ec10h21+o2=c10h20-5+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
2070. Ac10h21+o=ch2o+Ac9h19 2.00E+13 0.0 4000.0
2071. Bc10h21+o=ch3hco+Ac8h17 2.00E+13 0.0 4000.0
2072. Bc10h21+o=ch3+c8h17hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2073. Cc10h21+o=ethco+Ac7h15 2.00E+13 0.0 4000.0
2074. Cc10h21+o=c2h5+c7h15hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2075. Dc10h21+o=nc3h7+c6h13hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2076. Dc10h21+o=nc3h7hco+Ac6h13 2.00E+13 0.0 4000.0
2077. Ec10h21+o=pc4h9+c5h11hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2078. Ec10h21+o=nc4h9hco+Ac5h11 2.00E+13 0.0 4000.0
2079. Ac10h21+oh=ch2o+nc9h20 2.00E+13 0.0 4000.0
2080. Bc10h21+oh=ch3hco+nc8h18 2.00E+13 0.0 4000.0
2081. Bc10h21+oh=ch4+c8h17hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2082. Cc10h21+oh=ethco+nc7h16 2.00E+13 0.0 4000.0
2083. Cc10h21+oh=c2h6+c7h15hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2084. Dc10h21+oh=c3h8+c6h13hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2085. Dc10h21+oh=nc3h7hco+c6h14 2.00E+13 0.0 4000.0
2086. Ec10h21+oh=c4h10+c5h11hco 2.00E+13 0.0 4000.0
2087. Ec10h21+oh=nc4h9hco+nc5h12 2.00E+13 0.0 4000.0
2088. Ac10h21+ho2=ch2o+Ac9h19+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2089. Bc10h21+ho2=ch3hco+Ac8h17+oh 5.00E+12 0.0 0.0

2090. Bc10h21+ho2=ch3+c8h17hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2091. Cc10h21+ho2=ethco+Ac7h15+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2092. Cc10h21+ho2=c2h5+c7h15hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2093. Dc10h21+ho2=nc3h7+c6h13hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2094. Dc10h21+ho2=nc3h7hco+Ac6h13+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2095. Ec10h21+ho2=pc4h9+c5h11hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2096. Ec10h21+ho2=nc4h9hco+Ac5h11+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2097. Ac10h21=Dc10h21 5.13E+00 3.2 16849.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.17E-01 3.6 18942.0
2098. Ac10h21=Ec10h21 1.49E+01 3.0 10792.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.79E+00 3.1 12956.0
2099. Bc10h21=Dc10h21 2.95E+00 3.1 11017.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.95E+00 3.1 11017.0
2100. Bc10h21=Ec10h21 1.40E-01 3.7 12982.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.40E-01 3.7 12982.0
2101. Cc10h21=Dc10h21 1.86E+00 3.3 13199.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.86E+00 3.3 13199.0
2102. Cc10h21=Ec10h21 1.41E+00 3.3 16146.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.41E+00 3.3 16146.0
2103. c10h20-1=ac3h5+Ac7h15 2.50E+16 0.0 70000.0
2104. c10h20-1=Dc4h7-1+Ac6h13 1.00E+16 0.0 71000.0
2105. c10h20-1=Ec5h9-1+Ac5h11 1.00E+16 0.0 71000.0
2106. c10h20-1=Fc6h11-1+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
2107. Cc10h19-1+h=c10h20-1 1.00E+13 0.0 0.0
2108. Dc10h19-2+h=c10h20-2 1.00E+13 0.0 0.0
2109. Ec10h19-3+h=c10h20-3 1.00E+13 0.0 0.0
2110. Fc10h19-4+h=c10h20-4 1.00E+13 0.0 0.0
2111. c10h20-1+ho2=>oh+ch2o+c9h18-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2112. c10h20-2+ho2=>oh+ch3hco+c8h16-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2113. c10h20-2+ho2=>oh+c2h4+c7h15hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2114. c10h20-3+ho2=>oh+ethco+c7h14-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2115. c10h20-3+ho2=>oh+c3h6+c6h13hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2116. c10h20-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c6h12-1 2.50E+12 1.0 25000.0
2117. c10h20-4+ho2=>oh+c4h8+c5h11hco 2.50E+12 1.0 25000.0
2118. c10h20-5+ho2=>oh+c5h10+nc4h9hco 5.00E+12 1.0 25000.0
2119. c10h20-1+oh=ch2o+Ac9h19 1.40E+12 0.0 -900.0
2120. c10h20-1+oh=ch3+c8h17hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2121. c10h20-2+oh=ch3hco+Ac8h17 1.40E+12 0.0 -900.0
2122. c10h20-2+oh=c2h5+c7h15hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2123. c10h20-3+oh=ethco+Ac7h15 1.40E+12 0.0 -900.0
2124. c10h20-3+oh=nc3h7+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2125. c10h20-4+oh=nc3h7hco+Ac6h13 1.40E+12 0.0 -900.0
2126. c10h20-4+oh=pc4h9+c5h11hco 1.40E+12 0.0 -900.0
2127. c10h20-5+oh=Ac5h11+nc4h9hco 2.80E+12 0.0 -900.0
2128. c10h20-1+o=ch2o+c9h18-1 3.40E+07 1.8 550.0
2129. c10h20-2+o=ch3hco+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
2130. c10h20-2+o=c2h4+c7h15hco 3.40E+07 1.8 550.0
2131. c10h20-3+o=ethco+c7h14-1 3.40E+07 1.8 550.0
2132. c10h20-3+o=c3h6+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
2133. c10h20-4+o=nc3h7hco+c6h12-1 3.40E+07 1.8 550.0
2134. c10h20-4+o=c4h8+c5h11hco 3.40E+07 1.8 550.0
2135. c10h20-5+o=c5h10+nc4h9hco 6.80E+07 1.8 550.0
2136. c10h20-1+h=h2+Cc10h19-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2137. c10h20-1+oh=h2o+Cc10h19-1 3.10E+06 2.0 -300.0
2138. c10h20-1+ho2=h2o2+Cc10h19-1 6.80E+03 2.5 10115.0
2139. c10h20-1+ch3=ch4+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2140. c10h20-1+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2141. c10h20-1+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2142. c10h20-1+o=oh+Cc10h19-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2143. c10h20-2+h=h2+Cc10h19-1 1.70E+05 2.5 2490.0
2144. c10h20-2+oh=h2o+Cc10h19-1 3.10E+06 2.0 -300.0

2145. c10h20-2+ho2=h2o2+Cc10h19-1 1.02E+04 2.5 12340.5
2146. c10h20-2+ch3=ch4+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2147. c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 5675.0
2148. c10h20-2+c2h5=c2h6+Cc10h19-1 2.20E+00 3.5 6835.0
2149. c10h20-2+o=oh+Cc10h19-1 6.00E+10 0.7 7682.0
2150. c10h20-2+h=h2+Dc10h19-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2151. c10h20-2+oh=h2o+Dc10h19-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2152. c10h20-2+ho2=h2o2+Dc10h19-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2153. c10h20-2+ch3=ch4+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2154. c10h20-2+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2155. c10h20-2+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2156. c10h20-2+o=oh+Dc10h19-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2157. c10h20-3+h=h2+Dc10h19-2 1.70E+05 2.5 2490.0
2158. c10h20-3+oh=h2o+Dc10h19-2 3.10E+06 2.0 -300.0
2159. c10h20-3+ho2=h2o2+Dc10h19-2 6.80E+03 2.5 10115.0
2160. c10h20-3+ch3=ch4+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2161. c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 5675.0
2162. c10h20-3+c2h5=c2h6+Dc10h19-2 2.20E+00 3.5 6835.0
2163. c10h20-3+o=oh+Dc10h19-2 6.00E+10 0.7 7682.0
2164. c10h20-3+h=h2+Ec10h19-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2165. c10h20-3+oh=h2o+Ec10h19-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2166. c10h20-3+ho2=h2o2+Ec10h19-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2167. c10h20-3+ch3=ch4+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2168. c10h20-3+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2169. c10h20-3+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2170. c10h20-3+o=oh+Ec10h19-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2171. c10h20-4+h=h2+Ec10h19-3 1.70E+05 2.5 2490.0
2172. c10h20-4+oh=h2o+Ec10h19-3 3.10E+06 2.0 -300.0
2173. c10h20-4+ho2=h2o2+Ec10h19-3 6.80E+03 2.5 10115.0
2174. c10h20-4+ch3=ch4+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2175. c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 5675.0
2176. c10h20-4+c2h5=c2h6+Ec10h19-3 2.20E+00 3.5 6835.0
2177. c10h20-4+o=oh+Ec10h19-3 6.00E+10 0.7 7682.0
2178. c10h20-4+h=h2+Fc10h19-4 1.70E+05 2.5 2490.0
2179. c10h20-4+oh=h2o+Fc10h19-4 3.10E+06 2.0 -300.0
2180. c10h20-4+ho2=h2o2+Fc10h19-4 6.80E+03 2.5 10115.0
2181. c10h20-4+ch3=ch4+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2182. c10h20-4+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 5675.0
2183. c10h20-4+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 2.20E+00 3.5 6835.0
2184. c10h20-4+o=oh+Fc10h19-4 6.00E+10 0.7 7682.0
2185. c10h20-5+h=h2+Fc10h19-4 3.40E+05 2.5 2490.0
2186. c10h20-5+oh=h2o+Fc10h19-4 6.20E+06 2.0 -300.0
2187. c10h20-5+ho2=h2o2+Fc10h19-4 6.80E+03 2.5 10115.0
2188. c10h20-5+ch3=ch4+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 5675.0
2189. c10h20-5+ch3o2=ch3o2h+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 5675.0
2190. c10h20-5+c2h5=c2h6+Fc10h19-4 4.40E+00 3.5 6835.0
2191. c10h20-5+o=oh+Fc10h19-4 1.20E+11 0.7 7682.0
2192. c10h20-1+oh=c10h20rohAB 2.76E+12 0.0 -1042.0
2193. c10h20rohAB+o2=c10h20qjohAB 1.00E+12 0.0 -1100.0
2194. c10h20qjohAB=>oh+ch2o+c8h17hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2195. c10h20-2+oh=c10h20rohBC 2.76E+12 0.0 -1042.0
2196. c10h20rohBC+o2=c10h20qjohBC 1.00E+12 0.0 -1100.0
2197. c10h20qjohBC=>oh+ch3hco+c7h15hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2198. c10h20-3+oh=c10h20rohCD 2.76E+12 0.0 -1042.0
2199. c10h20rohCD+o2=c10h20qjohCD 1.00E+12 0.0 -1100.0
2200. c10h20qjohCD=>oh+ethco+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2201. c10h20-4+oh=c10h20rohDE 2.76E+12 0.0 -1042.0
2202. c10h20rohDE+o2=c10h20qjohDE 1.00E+12 0.0 -1100.0
2203. c10h20qjohDE=>oh+nc3h7hco+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2204. c10h20-5+oh=c10h20rohEF 2.76E+12 0.0 -1042.0
2205. c10h20rohEF+o2=c10h20qjohEF 1.00E+12 0.0 -1100.0

2206. c10h20qjohEF=>oh+nc4h9hco+nc4h9hco 1.00E+12 0.0 28680.0
2207. Cc10h19-1=c4h6+Ac6h13 1.34E+15 -0.5 38320.0
2208. Dc10h19-2=c5h8-13+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
2209. Ec10h19-3=c6h10-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
2210. Fc10h19-4=c7h12-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
2211. c4h6+c2h3=c6h9 2.00E+11 0.0 5000.0
2212. c4h6+c2h3=chd13+h 7.00E+11 0.0 1650.0
2213. Fc6h9-13=cyc6h9 1.00E+08 0.9 5900.0
2214. c6h9=chxe1rD 1.00E+08 0.9 5900.0
2215. cyc6h9+ho2=chd13+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
2216. cyc6h9+oh=chd13+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
2217. cyc6h9+o2=ho2+chd13 9.60E+12 0.0 15160.0
2218. cyc6h9=h+chd13 3.00E+13 0.0 50500.0
2219. cyc6h9+o=chd13+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2220. cyc6h9+h=chd13+h2 3.16E+13 0.0 0.0
2221. cyc6h9+ch3=chd13+ch4 8.00E+12 0.0 0.0
2222. cyc6h9+c2h3=chd13+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
2223. cyc6h9+c2h5=chd13+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
2224. cyc6h9+ac3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2225. cyc6h9+sc3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2226. cyc6h9+tc3h5=chd13+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2227. cyc6h9+hco=chd13+ch2o 4.00E+12 0.0 0.0
2228. cyc6h9+ch3o=chd13+ch3oh 4.00E+12 0.0 0.0
2229. cyc6h9+ho2=cyc6h9o+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
2230. cyc6h9+ho2=>cyc5h8+hco+oh 4.50E+12 0.0 0.0
2231. cyc6h9+o=cyc5h8+hco 8.26E+13 0.0 0.0
2232. cyc6h9+o2=acrol+c2h4+hco 3.01E+10 0.0 2870.0
2233. cyc6h9+o2=ac3h5co+c2h4o 1.31E+10 0.0 0.0
2234. chxe1rD=cyc6h9 1.30E+13 0.0 44500.0
2235. chxe1rD=Ac6h9-15 2.00E+13 0.0 35500.0
2236. chxe1rD+o2=ho2+chd13 9.60E+12 0.0 2500.0
2237. chxe1rD=h+chd13 3.20E+13 0.0 34500.0
2238. chxe1rD+o2=ho2+chd14 9.60E+12 0.0 5000.0
2239. chxe1rD=h+chd14 3.00E+13 0.0 33800.0
2240. Fc6e5oA=cyc6h9o 1.00E+08 0.9 5900.0
2241. c2h2+c3h6cho-1=Fc6e5oA 7.77E+06 1.4 7755.0
2242. Fc6e2oA=cyc6h9o 1.00E+08 0.9 5900.0
2243. c2h4+sc3h5co=Fc6e2oA 1.32E+04 2.5 6130.0
2244. sc3h5co=sc3h5+co 8.60E+15 0.0 23000.0
2245. Fc6h9-13+o2=hex135+ho2 2.70E+11 0.0 2500.0
2246. Fc6h9-13=hex135+h 3.20E+13 0.0 34800.0
2247. Fc6h9-13=nc4h5+c2h4 2.00E+13 0.0 35500.0
2248. Fc6h9-13+h=c6h10-13 1.00E+14 0.0 0.0
2249. c6h9=h+hex135 3.20E+13 0.0 40700.0
2250. c6h9+o2=ho2+hex135 1.60E+12 0.0 15160.0
2251. Ac6h9-15=c6h9 6.00E+08 1.0 12400.0
2252. Ac6h9-15=c2h2+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 33000.0
2253. Ac6h9-15+o2=Dc4h7-1+co+ch2o 4.50E+16 -1.4 1000.0
2254. Ac6h9-15+h=c6h10-15 1.00E+14 0.0 0.0
2255. hex135=chd13 4.50E+12 0.0 43300.0
2256. chd13=c6h6+h2 5.00E+14 0.0 65140.0
2257. chd13=c6h7C+h 5.01E+15 0.0 72598.0
2258. chd13+o2=c6h7C+ho2 8.31E+11 0.0 24858.0
2259. chd13+ho2=c6h7C+h2o2 4.00E+12 0.0 17057.0
2260. chd13+oh=c6h7C+h2o 5.60E+12 0.0 861.0
2261. chd13+o=c6h7C+oh 1.40E+13 0.0 -795.0
2262. chd13+h=c6h7C+h2 1.30E+13 0.0 4445.0
2263. chd13+ch3=c6h7C+ch4 1.23E+11 0.0 5201.0
2264. chd13+c2h5=c6h7C+c2h6 1.23E+11 0.0 5201.0
2265. chd13+c2h2=c6h6+c2h4 3.09E+10 0.0 27151.0
2266. chd13+c2h3=c6h7C+c2h4 1.23E+11 0.0 5201.0

2267. chd13+ac3h5=c6h7C+c3h6 1.23E+11 0.0 5201.0
2268. chd13+hco=c6h7C+ch2o 1.23E+11 0.0 5201.0
2269. chd13+ch3o=c6h7C+ch3oh 1.23E+11 0.0 5201.0
2270. chd13+nc4h5=c6h7C+c4h6 1.00E+11 0.0 13500.0
2271. chd13+ic4h5=c6h7C+c4h6 1.00E+11 0.0 13500.0
2272. chd14=c6h6+h2 2.30E+12 0.0 43800.0
2273. chd14=c6h7C+h 3.10E+14 0.0 77400.0
2274. chd14+o2=c6h7C+ho2 7.20E+12 0.0 27920.0
2275. chd14+ho2=c6h7C+h2o2 1.28E+04 2.6 12400.0
2276. chd14+h=c6h7C+h2 1.10E+05 2.5 -1900.0
2277. chd14+oh=c6h7C+h2o 6.00E+06 2.0 -1520.0
2278. chd14+ch3=c6h7C+ch4 2.00E+11 0.0 7300.0
2279. c2h2+nc4h5(+m)=c6h7C(+m) 4.80E+07 0.3 4700.0
Low pressure limit: 0.52000E+26 -0.42100E+01 0.40000E+04
2280. c6h7C=>c6h6+h 1.00E+10 0.0 0.0
2281. c6h7C+o2=c6h6+ho2 1.00E+12 0.0 0.0
2282. c6h7C+ho2=c6h6+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
2283. c6h7C+oh=c6h6+h2o 6.02E+12 0.0 0.0
2284. c6h7C+o=c6h6+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2285. c6h7C+h=c6h6+h2 3.16E+12 0.0 0.0
2286. c6h7C+ch3=c6h6+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
2287. c6h7C+c2h3=c6h6+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
2288. c6h7C+c2h5=c6h6+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
2289. c6h7C+ac3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2290. c6h7C+sc3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2291. c6h7C+tc3h5=c6h6+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2292. c6h7C+hco=c6h6+ch2o 4.00E+12 0.0 0.0
2293. c6h7C+c6h7C=c6h6+chd13 8.40E+10 0.0 -300.0
2294. c6h7C+h=c6h615+h2 2.00E+13 0.0 0.0
2295. c6h7C+ho2=>CPD+hco+oh 4.50E+12 0.0 0.0
2296. c6h7C+o=CPD+hco 8.26E+13 0.0 0.0
2297. cyc5h8=c3h6+c2h2 2.50E+13 0.0 62970.0
2298. cyc5h8=CPD+h2 1.58E+13 0.0 59780.0
2299. cyc5h8+o2=cyc5h7+ho2 1.28E+10 0.0 25000.0
2300. cyc5h8+ho2=cyc5h7+h2o2 1.60E+11 0.0 17060.0
2301. cyc5h8+oh=cyc5h7+h2o 4.80E+13 0.0 300.0
2302. cyc5h8+o=cyc5h7+oh 2.78E+11 0.0 2508.0
2303. cyc5h7=ac3h4+c2h3 3.16E+14 0.0 37000.0
2304. cyc5h7=CPD+h 3.16E+15 0.0 36000.0
2305. cyc5h7=c5h7 2.00E+13 0.0 30000.0
2306. cyc5h7+o2=acrol+ch2hco 4.00E+10 0.0 5000.0
2307. cyc5h7+o2=CPD+ho2 1.01E+12 0.0 13353.0
2308. cyc5h7+ho2=CPD+h2o2 2.65E+12 0.0 0.0
2309. cyc5h7+oh=CPD+h2o 6.02E+12 0.0 0.0
2310. cyc5h7+o=CPD+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2311. cyc5h7+h=CPD+h2 3.16E+13 0.0 0.0
2312. cyc6h12=3c2h4 8.22E+17 0.0 87225.0
2313. cyc6h12=cyc6h11+h 3.00E+16 0.0 95000.0
2314. cyc6h12+o2=cyc6h11+ho2 7.50E+13 0.0 49000.0
2315. cyc6h12+ho2=cyc6h11+h2o2 1.20E+13 0.0 17057.0
2316. cyc6h12+oh=cyc6h11+h2o 1.60E+07 2.0 -681.0
2317. cyc6h12+o=cyc6h11+oh 1.54E+14 0.0 4497.0
2318. cyc6h12+h=cyc6h11+h2 6.00E+14 0.0 8373.0
2319. cyc6h12+ch3=cyc6h11+ch4 1.35E+12 0.0 9540.0
2320. cyc6h12+c2h5=cyc6h11+c2h6 1.35E+12 0.0 9540.0
2321. cyc6h12+c2h3=cyc6h11+c2h4 1.35E+12 0.0 9540.0
2322. cyc6h12+ac3h5=>cyc6h11+c3h6 1.35E+12 0.0 9540.0
2323. cyc6h12+sc3h5=cyc6h11+c3h6 1.35E+12 0.0 9540.0
2324. cyc6h12+tc3h5=cyc6h11+c3h6 1.35E+12 0.0 9540.0
2325. cyc6h12+Cc4h7-1=>cyc6h11+c4h8 7.00E+11 0.0 9540.0
2326. cyc6h12+hco=cyc6h11+ch2o 1.35E+12 0.0 9540.0

2327. cyc6h12+ch3o=cyc6h11+ch3oh 4.32E+11 0.0 4473.0
2328. cyc6h11+o2=cyc6h10+ho2 1.00E+09 0.0 3000.0
2329. cyc6h11+o=cyc6h10+oh 9.64E+13 0.0 0.0
2330. cyc6h11+ho2=cyc6h10+h2o2 2.00E+12 0.0 2000.0
2331. cyc6h11+oh=cyc6h10+h2o 4.80E+13 0.0 0.0
2332. cyc6h11+h=cyc6h10+h2 2.00E+11 0.0 0.0
2333. cyc6h11+ch3=cyc6h10+ch4 4.00E+12 0.0 0.0
2334. cyc6h11+c2h3=cyc6h10+c2h4 4.00E+12 0.0 0.0
2335. cyc6h11+c2h5=cyc6h10+c2h6 4.00E+12 0.0 0.0
2336. cyc6h11+ac3h5=cyc6h10+c3h6 4.00E+11 0.0 0.0
2337. cyc6h11+sc3h5=cyc6h10+c3h6 4.00E+11 0.0 0.0
2338. cyc6h11+tc3h5=cyc6h10+c3h6 4.00E+12 0.0 0.0
2339. cyc6h11+hco=cyc6h10+ch2o 4.00E+12 0.0 0.0
2340. cyc6h11=cyc6h10+h 5.00E+12 0.0 40000.0
2341. cyc6h10=c4h6+c2h4 1.50E+15 0.0 66900.0
2342. cyc6h10+o2=cyc6h9+ho2 7.20E+13 0.0 34800.0
2343. cyc6h10+o2=chxe1rD+ho2 4.00E+13 0.0 50700.0
2344. cyc6h10=cyc6h9+h 1.20E+15 0.0 83200.0
2345. cyc6h10=chxe1rD+h 1.20E+15 0.0 98900.0
2346. cyc6h10=chd13+h2 5.00E+13 0.0 61700.0
2347. cyc6h10+o=cyc6h9+oh 1.80E+11 0.7 3250.0
2348. cyc6h10+h=cyc6h9+h2 1.10E+05 2.5 -1900.0
2349. cyc6h10+oh=cyc6h9+h2o 6.00E+06 2.0 -1520.0
2350. cyc6h10+ho2=cyc6h9+h2o2 1.30E+04 2.6 12400.0
2351. cyc6h10+ch3=cyc6h9+ch4 2.00E+11 0.0 7300.0
2352. cyc6h10+c2h3=cyc6h9+c2h4 2.00E+11 0.0 7300.0
2353. cyc6h10+c2h5=cyc6h9+c2h6 2.00E+11 0.0 7300.0
2354. cyc6h10+ac3h5=cyc6h9+c3h6 2.00E+11 0.0 7300.0
2355. cyc6h10+sc3h5=cyc6h9+c3h6 2.00E+11 0.0 7300.0
2356. cyc6h10+tc3h5=cyc6h9+c3h6 2.00E+11 0.0 7300.0
2357. cyc6h10+hco=cyc6h9+ch2o 2.00E+11 0.0 7300.0
2358. cyc6h10+ch3o=cyc6h9+ch3oh 2.00E+11 0.0 7300.0
2359. cyc6h10+o=chxe1rD+oh 5.20E+13 0.0 5200.0
2360. cyc6h10+h=chxe1rD+h2 1.80E+07 2.0 5000.0
2361. cyc6h10+oh=chxe1rD+h2o 5.20E+06 2.0 -770.0
2362. cyc6h10+ho2=chxe1rD+h2o2 8.00E+11 0.0 15500.0
2363. cyc6h10+ch3=chxe1rD+ch4 4.00E+11 0.0 9600.0
2364. chxone+oh=Bchxone+h2o 1.69E+12 0.0 -228.0
2365. chxone+h=Bchxone+h2 8.92E+06 2.0 3200.0
2366. chxone+o2=Bchxone+ho2 3.10E+13 0.0 41970.0
2367. chxone+ho2=Bchxone+h2o2 4.00E+11 0.0 8698.0
2368. chxone+ch3=Bchxone+ch4 3.48E+00 3.5 3680.0
2369. chxone+o=Bchxone+oh 6.14E+13 0.0 3400.0
2370. chxone+oh=Cchxone+h2o 1.10E+13 0.0 790.0
2371. chxone+h=Cchxone+h2 2.60E+06 2.4 2583.0
2372. chxone+o2=Cchxone+ho2 1.40E+13 0.0 49910.0
2373. chxone+ho2=Cchxone+h2o2 1.93E+04 2.6 13910.0
2374. chxone+ch3=Cchxone+ch4 3.02E+00 3.5 5481.0
2375. chxone+o=Cchxone+oh 1.10E+06 2.5 2830.0
2376. chxone+oh=Dchxone+h2o 5.50E+12 0.0 790.0
2377. chxone+h=Dchxone+h2 1.30E+06 2.4 2583.0
2378. chxone+o2=Dchxone+ho2 7.00E+12 0.0 49910.0
2379. chxone+ho2=Dchxone+h2o2 9.51E+03 2.6 13910.0
2380. chxone+ch3=Dchxone+ch4 1.51E+00 3.5 5481.0
2381. chxone+o=Dchxone+oh 5.50E+05 2.5 2830.0
2382. Bchxone+h=chxe2oA 1.20E+13 0.0 38200.0
2383. Bchxone+o2=chxe2oA+ho2 1.00E+09 0.0 0.0
2384. Fc6e1oC=Bchxone 1.00E+08 0.9 5900.0
2385. Cchxone+h=chxe2oA 1.20E+13 0.0 33820.0
2386. Cchxone+h=chxe3oA 1.20E+13 0.0 38115.0
2387. Cchxone+o2=chxe2oA+ho2 1.00E+09 0.0 0.0

2388. Cchxone+o2=chxe3oA+ho2 1.00E+09 0.0 0.0
2389. c6e5oyA=Cchxone 1.00E+08 0.9 5900.0
2390. Ac6e5oC=Cchxone 1.00E+08 0.9 5900.0
2391. c2h4+ac3h5co=Ac6e5oC 1.00E+11 0.0 7800.0
2392. Dchxone=h+chxe3oA 1.20E+13 0.0 37315.0
2393. Dchxone+o2=chxe3oA+ho2 1.00E+09 0.0 0.0
2394. Ac6e5oB=Dchxone 1.00E+08 0.9 5900.0
2395. ch2co+Dc4h7-1=Ac6e5oB 3.33E+10 0.0 6397.0
2396. chxe2oA+o2=>Dchxe2oA+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
2397. chxe2oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2398. chxe2oA+oh=>Dchxe2oA+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
2399. chxe2oA+o=>Dchxe2oA+oh 2.60E+12 0.0 4500.0
2400. chxe2oA+h=>Dchxe2oA+h2 1.95E+13 0.0 4445.0
2401. chxe2oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2402. chxe3oA+o2=>Dchxe2oA+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
2403. chxe3oA+ho2=>Dchxe2oA+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2404. chxe3oA+oh=>Dchxe2oA+h2o 4.19E+06 2.0 -543.0
2405. chxe3oA+o=>Dchxe2oA+oh 2.60E+12 0.0 4500.0
2406. chxe3oA+h=>Dchxe2oA+h2 1.95E+13 0.0 4445.0
2407. chxe3oA+ch3=>Dchxe2oA+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2408. Dchxe2oA+o2=ho2+che24one 5.90E+05 0.0 0.0
2409. Ac6e3e5oB=Dchxe2oA 1.00E+08 0.9 5900.0
2410. ch2co+nc4h5=Ac6e3e5oB 2.00E+11 0.0 2010.0
2411. Gc7h13-1=mchA 1.00E+08 0.9 5900.0
2412. Gc7h13-1=Cc7h13-1 1.00E+12 0.0 22880.0
2413. Gc7h13-1=Dc7h13-1 1.00E+11 0.0 18100.0
2414. c2h4+Ec5h9-1=Gc7h13-1 2.64E+04 2.5 6130.0
2415. mchA+o2=mche1+ho2 8.00E+12 0.0 10000.0
2416. mchA+h=mche1+h2 2.00E+11 0.0 0.0
2417. mchA+oh=mche1+h2o 5.00E+13 0.0 0.0
2418. mchA+o=mche1+oh 1.00E+14 0.0 0.0
2419. mchA+ch3=mche1+ch4 4.00E+12 0.0 0.0
2420. mchB=c2h4+isoph 2.00E+13 0.0 45000.0
2421. mchB+h=mche1+h2 2.00E+11 0.0 0.0
2422. mchB+oh=mche1+h2o 5.00E+13 0.0 0.0
2423. mchB+o=mche1+oh 1.00E+14 0.0 0.0
2424. mchB+ch3=mche1+ch4 4.00E+12 0.0 0.0
2425. mche1=>c4h6+c3h6 1.00E+16 0.0 71000.0
2426. mche1+oh=cyc6h11+ch2o 1.00E+12 0.0 0.0
2427. mche1+oh=ch3+chxone 1.00E+12 0.0 0.0
2428. mche1+h=mchB 2.64E+13 0.0 2160.0
2429. mche1+h=mchA 1.32E+13 0.0 4660.0
2430. mche1+h=Cmche1+h2 1.10E+05 2.5 -1900.0
2431. mche1+o=Cmche1+oh 1.80E+11 0.7 3250.0
2432. mche1+oh=Cmche1+h2o 6.00E+06 2.0 -1520.0
2433. mche1+ho2=Cmche1+h2o2 1.30E+04 2.6 12400.0
2434. mche1+ch3=Cmche1+ch4 2.00E+11 0.0 7300.0
2435. mche1+o2=Dmche1+ho2 4.00E+13 0.0 50700.0
2436. mche1+o=Dmche1+oh 5.20E+13 0.0 5200.0
2437. mche1+h=Dmche1+h2 1.80E+07 2.0 5000.0
2438. mche1+oh=Dmche1+h2o 5.20E+06 2.0 -770.0
2439. mche1+ho2=Dmche1+h2o2 8.00E+11 0.0 15500.0
2440. mche1+ch3=Dmche1+ch4 4.00E+11 0.0 9600.0
2441. mche1+oh=BmchohA 4.75E+12 0.0 -782.0
2442. BmchohA+o2=mchohAqjB 1.84E+45 -11.1 6538.0
2443. mchohAqjB=>oh+ch2o+chxone 1.00E+16 0.0 25000.0
2444. Cmche1=>c2h4+isopy 2.00E+13 0.0 38000.0
2445. Cmche1=h+mche13 1.20E+13 0.0 43500.0
2446. Cmche1+o2=ch2co+c2h4+ch2ch2hco 3.01E+10 0.0 2870.0
2447. Dmche1+o2=ho2+mche13 9.60E+12 0.0 2500.0
2448. Dmche1=h+mche13 3.20E+13 0.0 34500.0

2449. Dmche1+o2=ho2+mche14 9.60E+12 0.0 5000.0
2450. Dmche1=h+mche14 3.00E+13 0.0 33800.0
2451. mche13+h=Emche13+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
2452. mche13+o=Emche13+oh 1.30E+12 0.0 4500.0
2453. mche13+oh=Emche13+h2o 3.00E+12 0.0 1230.0
2454. mche13+ho2=Emche13+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2455. mche13+ch3=Emche13+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
2456. mche13+h=Gmche13+h2 6.55E+12 0.0 4445.0
2457. mche13+o=Gmche13+oh 1.30E+12 0.0 4500.0
2458. mche13+oh=Gmche13+h2o 3.00E+12 0.0 1230.0
2459. mche13+ho2=Gmche13+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2460. mche13+ch3=Gmche13+ch4 2.00E+11 0.0 6800.0
2461. mche14+h=Emche13+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
2462. mche14+o=Emche13+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
2463. mche14+oh=Emche13+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
2464. mche14+ho2=Emche13+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
2465. mche14+ch3=Emche13+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2466. mche14+h=Gmche14+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
2467. mche14+o=Gmche14+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
2468. mche14+oh=Gmche14+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
2469. mche14+ho2=Gmche14+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
2470. mche14+ch3=Gmche14+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2471. mche14+h=Fmche14+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
2472. mche14+o=Fmche14+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
2473. mche14+oh=Fmche14+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
2474. mche14+ho2=Fmche14+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
2475. mche14+ch3=Fmche14+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2476. Gmche13+o2=mche136+ho2 2.00E+09 0.0 -1506.0
2477. Emche13+o2=mche135+ho2 2.00E+09 0.0 -1506.0
2478. Gmche14+o2=mche135+ho2 9.60E+12 0.0 2500.0
2479. Fmche14+o2=mche135+ho2 9.60E+12 0.0 2500.0
2480. mche135+h=phch2+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
2481. mche135+o=phch2+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
2482. mche135+oh=phch2+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
2483. mche135+ho2=phch2+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
2484. mche135+ch3=phch2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2485. mche136+h=phch2+h2 5.50E+04 2.5 -1900.0
2486. mche136+o=phch2+oh 9.00E+10 0.7 3250.0
2487. mche136+oh=phch2+h2o 3.00E+06 2.0 -1520.0
2488. mche136+ho2=phch2+h2o2 6.50E+03 2.6 12400.0
2489. mche136+ch3=phch2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2490. mchoA+oh=chxco+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
2491. mchoA+h=chxco+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
2492. mchoA+ho2=chxco+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
2493. chxco=cyc6h11+co 2.00E+13 0.0 28700.0
2494. chxco+ho2=>cyc6h11+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
2495. AmchoC=>co+Fc6h11-1 1.78E+16 -0.4 25157.0
2496. AmchoC=>2c2h4+c2h3co 3.31E+15 -0.1 24999.0
2497. Ac7e6oB=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
2498. Gc7e1oD=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
2499. Cc5h9-1+ch2co=Ac7e6oB 1.00E+11 0.0 11900.0
2500. c2h4+Ac5e4oB=Gc7e1oD 1.32E+04 2.5 6130.0
2501. ch2co+ac3h5=Ac5e4oB 1.00E+11 0.0 11900.0
2502. Gc7e1oF=AmchoD 1.00E+08 0.9 5900.0
2503. ch2co+Ec5h9-1=Gc7e1oF 1.76E+04 2.5 6130.0
2504. c3h3+c3h3=c6h615 4.00E+12 0.0 0.0
2505. c6h615=hex1245 1.80E+11 0.0 35804.0
2506. hex1245=mc6h6 5.00E+11 0.0 22081.0
2507. mc6h6=fulvene 4.26E+13 0.0 49282.0
2508. mc6h6=c6h6 3.79E+13 0.0 22000.0
2509. CPD+o2=c5h5+ho2 2.00E+13 0.0 25000.0

2510. CPD+ho2=c5h5+h2o2 2.00E+12 0.0 11660.0
2511. CPD+oh=c5h5+h2o 3.43E+09 1.2 -447.0
2512. CPD+h=c5h5+h2 2.19E+08 1.8 3000.0
2513. CPD+h=c3h3+c2h4 2.00E+14 0.0 10000.0
2514. CPD+o=c5h5+oh 1.81E+13 0.0 3080.0
2515. CPD+ch3=c5h5+ch4 3.11E+11 0.0 5500.0
2516. CPD+c2h3=c5h5+c2h4 3.11E+11 0.0 5500.0
2517. CPD+c2h5=c5h5+c2h6 3.11E+11 0.0 5500.0
2518. CPD+nc4h5=c5h5+c4h6 3.11E+11 0.0 5500.0
2519. CPD+ic4h5=c5h5+c4h6 3.11E+11 0.0 5500.0
2520. CPD+c6h5=c5h5+c6h6 3.11E+11 0.0 5500.0
2521. CPD+o2=>c3h4o+ch2co 3.00E+08 0.0 3000.0
2522. c5h5+ho2=c5h5o+oh 3.00E+13 0.0 0.0
2523. c5h5+oh=c5h4oh+h 9.00E+13 0.0 0.0
2524. c5h5+oh=c4h6+co 4.00E+14 0.0 4500.0
2525. c5h5+h(+m)=CPD(+m) 1.00E+14 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.44000E+81 -0.18280E+02 0.12994E+05
TROE centering: 0.68000E-01 0.40000E+03 0.41360E+04 0.55000E+04
2526. c5h5+o=c5h4o+h 5.81E+13 0.0 20.0
2527. c5h5+o=nc4h5+co 2.00E+14 0.0 0.0
2528. c5h4oh=c5h4o+h 2.10E+13 0.0 48000.0
2529. c5h5o=nc4h5+co 2.51E+11 0.0 43900.0
2530. c5h4o+h=nc4h5+co 2.10E+61 -13.3 40810.0
2531. c5h4o=>co+c4h4 1.00E+12 0.0 53000.0
2532. c6h6+o2=c6h5+ho2 6.31E+13 0.0 60014.0
2533. c6h6+ho2=c6h5+h2o2 5.40E+04 2.5 27620.0
2534. c6h6+oh=c6h5+h2o 1.20E+00 4.1 -301.1
2535. c6h6+h=c6h5+h2 1.42E+08 1.8 13056.0
2536. c6h6+o=c6h5o+h 6.22E+13 -0.2 4408.0
2537. c6h6+ch3=c6h5+ch4 2.62E+13 0.0 19336.0
2538. c6h6+c2h5=c6h5+c2h6 6.31E+11 0.0 14864.0
2539. c6h6+c2h3=c6h5+c2h4 4.08E-01 4.0 88023.0
Reverse Arrhenius coefficients: 9.44E-03 4.5 4470.0
2540. c6h6+nc4h5=c6h5+c4h6 4.10E-01 4.0 8803.0
2541. c6h6+ic4h5=c6h5+c4h6 4.10E-01 4.0 8803.0
2542. c6h6+o=c6h5+oh 2.00E+13 0.0 14700.0
2543. c6h5+o=c5h5+co 9.00E+13 0.0 0.0
2544. c6h5+o2=c6h5o+o 2.57E-29 12.7 -5699.0
2545. nc4h3+c2h2=c6h5 2.80E+03 2.9 1400.0
2546. c6h5+h=c6h6 2.20E+14 0.0 0.0
2547. c6h5+ho2=c6h5o+oh 5.00E+13 0.0 1000.0
2548. c6h5+oh=c6h5o+h 5.00E+13 0.0 0.0
2549. c6h5+c2h=phc2h 3.00E+08 0.0 1391.0
2550. c6h5+c2h2=phc2h+h 1.00E+13 0.0 7647.0
2551. c6h5+c4h2=phc2h+c2h 2.00E+13 0.0 0.0
2552. c6h5+c4h4=phc2h+c2h3 1.00E+13 0.0 7647.0
2553. c6h5+o2=c6h5o2 1.86E+13 -0.2 -711.0
2554. c6h5o+o=c6h5o2 2.81E+13 -0.2 -1935.0
2555. c6h5+c3h6=ac3h5+c6h6 1.36E+00 3.8 1437.0
2556. oh+c6h5oh=h2o+c6h5o 1.39E+08 1.4 -962.0
2557. c6h5oh+o=c6h5o+oh 1.28E+13 0.0 2891.0
2558. c6h5oh+ho2=c6h5o+h2o2 3.00E+13 0.0 15000.0
2559. c6h5oh+nc4h5=c4h6+c6h5o 3.00E+02 3.0 7650.0
2560. c6h5oh+ic4h5=c4h6+c6h5o 6.00E+12 0.0 0.0
2561. c6h5oh+c6h5=c6h6+c6h5o 4.91E+12 0.0 4400.0
2562. c6h5oh+h=c6h6+oh 2.21E+13 0.0 7910.0
2563. c6h5oh+h=c6h5o+h2 1.15E+14 0.0 12400.0
2564. c6h5oh+ch3=c6h5o+ch4 3.00E+02 3.0 7650.0
2565. c6h5oh+c2h5=c6h5o+c2h6 3.00E+02 3.0 7650.0
2566. c6h5oh+c2h3=c6h5o+c2h4 3.00E+02 3.0 7650.0
2567. c6h5oh=CPD+co 8.62E+15 -0.6 74122.6

2568. c6h5o+CPD=c5h5+c6h5oh 3.16E+11 0.0 8000.0
2569. c6h5o+o=c6h4o2+h 3.00E+13 0.0 0.0
2570. c6h5o=c5h5+co 7.40E+11 0.0 43853.0
2571. c6h5o+h(+m)=c6h5oh(+m) 2.50E+14 0.0 0.0
Low pressure limit: 0.10000E+95 -0.21840E+02 0.13880E+05
TROE centering: 0.43000E-01 0.30400E+03 0.60000E+05 0.59000E+04
2572. c6h5o+h=CPD+co 1.06E+53 -10.7 41360.0
2573. c6h5o+o=c5h5+co2 1.00E+13 0.0 0.0
2574. c6h5o2=c6h4o2+h 4.00E+08 0.0 0.0
2575. c6h5o2=c5h5+co2 1.20E+08 0.0 0.0
2576. c6h5o2+h=c6h5o2h 2.50E+14 0.0 0.0
2577. c6h5o+oh=c6h5o2h 1.00E+12 0.0 0.0
2578. c6h5o2+ho2=c6h5o2h+o2 1.87E+12 0.0 1540.0
2579. c6h5o2+c6h5oh=c6h5o2h+c6h5o 1.00E+12 0.0 6961.0
2580. c6h5o+ho2=c6h5o2+oh 1.50E+14 0.0 23650.0
2581. c6h4o2=c5h4+co2 3.50E+12 0.0 67000.0
2582. c6h4o2+h=>c5h5o+co 2.50E+13 0.0 4700.0
2583. c6h4o2+h=>c6h3o2+h2 2.00E+12 0.0 8100.0
2584. c6h4o2+oh=>c6h3o2+h2o 1.00E+06 2.0 4000.0
2585. c6h4o2+o=>c6h3o3+h 1.50E+13 0.0 4530.0
2586. c6h4o2+o=>c6h3o2+oh 1.40E+13 0.0 14700.0
2587. c6h3o2+h=>c2h2+c2h2+co+co 1.00E+14 0.0 0.0
2588. c6h3o2+o=>c2h2+hcco+co+co 1.00E+14 0.0 0.0
2589. c6h3o3=>c2h2+hcco+co+co 1.00E+12 0.0 50000.0
2590. che24one=c6h5oh 7.62E+09 0.9 51100.0
2591. che24one=>c6h5o+h 1.40E+15 0.0 54000.0
2592. che24one+h=cyc5h7+co 2.51E+13 0.0 4700.0
2593. che24one+o2=c6h5o+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
2594. che24one+ho2=c6h5o+h2o2 9.63E+03 2.6 13910.0
2595. che24one+oh=c6h5o+h2o 3.12E+06 2.0 -298.0
2596. che24one+o=c6h5o+oh 2.60E+12 0.0 4500.0
2597. che24one+h=c6h5o+h2 1.95E+13 0.0 4445.0
2598. che24one+ch3=c6h5o+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2599. nc4h5+ac3h4=toluen+h 2.00E+11 0.0 3700.0
2600. nc4h5+pc3h4=toluen+h 6.32E+11 0.0 3700.0
2601. toluen=c6h5+ch3 1.40E+16 0.0 99800.0
2602. toluen=phch2+h 3.00E+15 0.0 88194.0
2603. toluen+o2=phch2+ho2 3.00E+14 0.0 43062.0
2604. toluen+ho2=phch2+h2o2 3.00E+14 0.0 22010.0
2605. toluen+oh=phch2+h2o 1.77E+05 2.4 -602.0
2606. toluen+oh=c6h5oh+ch3 7.83E+02 2.9 3221.0
2607. toluen+o=phch2+oh 6.30E+11 0.0 0.0
2608. toluen+h=phch2+h2 1.26E+14 0.0 8364.0
2609. toluen+h=c6h6+ch3 2.40E+13 0.0 5123.0
2610. toluen+ch3=phch2+ch4 8.88E+10 0.0 8754.0
2611. toluen+c2h5=phch2+c2h6 1.01E+11 0.0 9514.0
2612. toluen+c6h5=phch2+c6h6 2.10E+12 0.0 4400.0
2613. toluen+nc4h5=phch2+c4h6 4.00E+12 0.0 7500.0
2614. toluen+c2h3=phch2+c2h4 4.00E+12 0.0 7500.0
2615. phch2=c4h4+c3h3 2.00E+14 0.0 83600.0
2616. phch2=c5h5+c2h2 6.03E+13 0.0 70000.0
2617. phch2+o2=phhco+oh 6.31E+12 0.0 43000.0
2618. phch2+ho2=phch2o+oh 2.00E+13 0.0 0.0
2619. phch2+oh=phch2oh 2.00E+13 0.0 0.0
2620. phch2+o=phhco+h 1.58E+13 0.0 0.0
2621. phch2+o=c6h5+ch2o 1.00E+13 0.0 0.0
2622. phch2+c3h3=toluen+c3h2 1.00E+12 0.0 0.0
2623. phch2+c6h5oh=toluen+c6h5o 1.05E+11 0.0 9500.0
2624. phch2oh+o2=>phhco+ho2+h 2.00E+14 0.0 41400.0
2625. phch2oh+oh=>phhco+h2o+h 8.43E+12 0.0 2583.0
2626. phch2oh+h=c6h6+ch2oh 1.20E+13 0.0 5148.0
2627. phch2oh+phch2=>phhco+toluen+h 2.11E+11 0.0 9500.0
2628. phch2oh+c6h5=>phhco+c6h6+h 1.40E+12 0.0 4400.0
2629. phch2o=phhco+h 1.30E+14 0.0 1100.0
2630. phhco=phco+h 3.98E+15 0.0 83701.0
2631. phhco+o2=phco+ho2 1.02E+13 0.0 39000.0
2632. phhco+ho2=phco+h2o2 2.00E+12 0.0 11665.0
2633. phhco+oh=phco+h2o 1.71E+09 1.2 -447.0
2634. phhco+oh=c6h5oh+hco 1.20E+13 0.0 5123.0
2635. phhco+o=phco+oh 9.04E+12 0.0 3080.0
2636. phhco+h=phco+h2 5.00E+13 0.0 4928.0
2637. phhco+h=c6h6+hco 1.20E+13 0.0 5148.0
2638. phhco+ch3=phco+ch4 2.77E+03 2.8 5773.0
2639. phhco+c6h5=phco+c6h6 7.01E+11 0.0 4400.0
2640. phco=c6h5+co 3.98E+14 0.0 29401.0
2641. phco+o2=c6h5o+co2 3.00E+10 0.0 2870.0
2642. phco+ho2=>c6h5+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
2643. phc2h5=c6h6+c2h4 1.15E+09 0.0 51699.0
2644. phc2h5=phch2+ch3 5.00E+16 0.0 78127.0
2645. phc2h5=c6h5+c2h5 5.00E+16 0.0 100399.0
2646. phc2h5=Bphc2h4+h 2.51E+15 0.0 81260.0
2647. phc2h5=Aphc2h4+h 8.00E+15 0.0 100226.0
2648. phc2h5+o2=Aphc2h4+ho2 4.00E+13 0.0 50620.0
2649. phc2h5+o2=Bphc2h4+ho2 4.00E+13 0.0 38220.0
2650. phc2h5+h=c2h5+c6h6 2.40E+13 0.0 5123.0
2651. phc2h5+h=Aphc2h4+h2 7.20E+08 1.5 7412.0
2652. phc2h5+h=Bphc2h4+h2 3.30E+07 2.0 5346.0
2653. phc2h5+oh=Aphc2h4+h2o 1.99E+07 1.8 1133.0
2654. phc2h5+oh=Bphc2h4+h2o 7.09E+06 1.9 -1159.0
2655. phc2h5+o=Aphc2h4+oh 5.00E+08 1.5 5802.0
2656. phc2h5+o=Bphc2h4+oh 5.49E+05 2.5 2140.0
2657. phc2h5+ho2=Aphc2h4+h2o2 1.80E+04 2.5 16792.0
2658. phc2h5+ho2=Bphc2h4+h2o2 6.80E+03 2.5 10115.0
2659. phc2h5+ch3=Aphc2h4+ch4 2.75E-01 4.0 8287.0
2660. phc2h5+ch3=Bphc2h4+ch4 7.50E-01 3.5 4485.0
2661. Aphc2h4=styren+h 3.16E+13 0.0 50670.0
2662. Aphc2h4=c6h5+c2h4 1.00E+14 0.0 35000.0
2663. Bphc2h4=styren+h 1.80E+13 0.0 47025.0
2664. Bphc2h4+o2=styren+ho2 1.58E+12 0.0 15200.0
2665. Bphc2h4+o=c6h5+ch3hco 1.60E+13 0.0 0.0
2666. Bphc2h4+o=phhco+ch3 1.60E+13 0.0 0.0
2667. Bphc2h4+oh=phhco+ch4 1.60E+13 0.0 0.0
2668. Bphc2h4+ho2=>phhco+ch3+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2669. nc4h5+c4h4=styren+h 3.16E+11 0.0 3700.0
2670. c4h4+c4h4=styren 1.48E+14 0.0 38003.0
2671. c6h5+c2h3=styren 1.00E+13 0.0 0.0
2672. styren=c6h6+c2h2 1.60E+11 0.0 58438.0
2673. styren=ASTYRYL+h 5.00E+15 0.0 109400.0
2674. styren=BSTYRYL+h 5.00E+15 0.0 109400.0
2675. styren+o2=ASTYRYL+ho2 4.00E+13 0.0 59800.0
2676. styren+o2=BSTYRYL+ho2 4.00E+13 0.0 59800.0
2677. styren+oh=ASTYRYL+h2o 5.00E+12 0.0 6936.0
2678. styren+oh=BSTYRYL+h2o 5.00E+12 0.0 5936.0
2679. styren+h=ASTYRYL+h2 5.00E+13 0.0 15009.0
2680. styren+h=BSTYRYL+h2 5.00E+13 0.0 14009.0
2681. styren+ho2=ASTYRYL+h2o2 7.50E+10 0.0 14190.0
2682. styren+ho2=BSTYRYL+h2o2 7.50E+10 0.0 13190.0
2683. styren+o=phch2+hco 1.20E+08 1.4 530.0
2684. styren+o=c6h5+ch2hco 6.00E+07 1.4 530.0
2685. styren+c6h5=ASTYRYL+c6h6 2.00E+11 0.0 20000.0
2686. styren+c6h5=BSTYRYL+c6h6 2.00E+11 0.0 19000.0
2687. styren+c6h5o=ASTYRYL+c6h5oh 2.00E+11 0.0 20000.0
2688. styren+c6h5o=BSTYRYL+c6h5oh 2.00E+11 0.0 19000.0
2689. styren+c5h5=ASTYRYL+CPD 2.00E+11 0.0 20000.0
2690. styren+c5h5=BSTYRYL+CPD 2.00E+11 0.0 19000.0
2691. styren+oh=c6h4c2h3+h2o 1.63E+07 1.4 1454.0
2692. styren+h=>c6h4c2h3+h2 1.90E+07 2.0 9698.0
2693. styren+ho2=>phch2+hco+oh 2.50E+12 1.0 25000.0
2694. styren+ho2=>phhco+ch2+oh 2.50E+12 1.0 25000.0
2695. styren+h=c6h6+c2h3 2.40E+13 0.0 5123.0
2696. ASTYRYL+h=BSTYRYL+h 1.00E+14 0.0 0.0
2697. ASTYRYL=c6h5+c2h2 1.00E+14 0.0 36850.0
2698. ASTYRYL=phc2h+h 3.00E+12 0.0 37830.0
2699. ASTYRYL+o2=phhco+hco 2.00E+11 0.0 14000.0
2700. ASTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6 1.00E+13 0.0 0.0
2701. BSTYRYL+o2=phco+ch2o 2.00E+11 0.0 14000.0
2702. BSTYRYL+o=c6h5+ch2co 1.60E+13 0.0 0.0
2703. BSTYRYL=phc2h+h 3.00E+12 0.0 48030.0
2704. BSTYRYL+c6h5=phc2h+c6h6 1.00E+13 0.0 0.0
2705. BSTYRYL+oh=phc2h+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
2706. BSTYRYL+h=phc2h+h2 5.00E+13 0.0 0.0
2707. phch2hco+o2=>phch2co+ho2 2.00E+13 0.5 42200.0
2708. phch2hco+ho2=>phch2co+h2o2 4.10E+04 2.5 10204.0
2709. phch2hco+oh=>phch2co+h2o 2.69E+08 1.4 -1574.0
2710. phch2hco+o=>phch2co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
2711. phch2hco+h=>phch2co+h2 4.10E+09 1.2 2404.0
2712. phch2hco+ch3=>phch2co+ch4 3.50E-08 6.2 1639.0
2713. phch2hco=>phch2+hco 5.00E+16 0.0 71600.0
2714. phch2hco+h=c6h6+ch2hco 5.78E+13 0.0 8088.0
2715. phch2co=phch2+co 3.98E+14 0.0 29401.0
2716. phch2co+o2=phch2o+co2 3.00E+10 0.0 2870.0
2717. phch2co+ho2=>phch2+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
2718. phcoch2=c6h5+ch2co 2.00E+13 0.0 51940.0
2719. phc2h+oh=>c6h6+hcco 1.00E+13 0.0 0.0
2720. phc2h+h=c6h4c2h+h2 5.00E+13 -0.5 1500.0
2721. phc2h+oh=c6h4c2h+h2o 1.05E+13 0.0 4565.0
2722. phc2h+c2h=c6h4c2h+c2h2 2.00E+13 0.0 0.0
2723. phc2h+o=c6h5cco+h 4.80E+09 1.0 0.0
2724. phc2h+ch3=c6h4c2h+ch4 1.67E+12 0.0 15057.0
2725. c6h4c2h+c2h2=A1c2hAC 1.90E+21 -2.9 8100.0
2726. c6h4c2h+c2h2=A2-X 5.10E+48 -10.5 28000.0
2727. c6h4c2h+h=phc2h 4.20E+11 0.5 -71.7
2728. c6h5cco+o2=phco+co2 1.00E+12 0.0 0.0
2729. pbz=c6h5+nc3h7 1.00E+17 0.0 86500.0
2730. pbz=phch2+c2h5 8.00E+15 0.0 73500.0
2731. pbz=Aphc2h4+ch3 1.00E+17 0.0 77500.0
2732. pbz=pbzjA+h 9.00E+15 0.0 100210.0
2733. pbz=pbzjB+h 6.00E+15 0.0 99110.0
2734. pbz=pbzjC+h 6.00E+15 0.0 86210.0
2735. pbz+o2=pbzjA+ho2 4.00E+13 0.0 50600.0
2736. pbz+o2=pbzjB+ho2 4.00E+13 0.0 49500.0
2737. pbz+o2=pbzjC+ho2 4.00E+13 0.0 35800.0
2738. pbz+h=nc3h7+c6h6 2.40E+13 0.0 5123.0
2739. pbz+h=pbzjA+h2 1.33E+06 2.5 6756.0
2740. pbz+h=pbzjB+h2 1.30E+06 2.4 4470.0
2741. pbz+h=pbzjC+h2 1.01E+04 2.9 1931.0
2742. pbz+o=pbzjA+oh 1.93E+05 2.7 3716.0
2743. pbz+o=pbzjB+oh 4.77E+04 2.7 2106.0
2744. pbz+o=pbzjC+oh 4.77E+04 2.7 1106.0
2745. pbz+oh=pbzjA+h2o 3.16E+07 1.8 934.0
2746. pbz+oh=pbzjB+h2o 7.08E+06 1.9 -159.0
2747. pbz+oh=pbzjC+h2o 2.65E+12 0.0 0.0
2748. pbz+ho2=pbzjA+h2o2 4.76E+04 2.5 16494.0
2749. pbz+ho2=pbzjB+h2o2 9.64E+03 2.6 13910.0
2750. pbz+ho2=pbzjC+h2o2 9.64E+03 2.6 12910.0
2751. pbz+ch3=pbzjA+ch4 2.75E-01 3.6 7150.0
2752. pbz+ch3=pbzjB+ch4 6.00E+11 0.0 10120.0
2753. pbz+ch3=pbzjC+ch4 6.00E+11 0.0 10120.0
2754. pbz+c2h3=pbzjA+c2h4 6.00E+02 3.3 10502.0
2755. pbz+c2h3=pbzjB+c2h4 1.00E+03 3.1 8829.0
2756. pbz+c2h3=pbzjC+c2h4 1.00E+03 3.1 8829.0
2757. pbz+c2h5=pbzjA+c2h6 3.16E+11 0.0 12300.0
2758. pbz+c2h5=pbzjB+c2h6 5.01E+10 0.0 10400.0
2759. pbz+c2h5=pbzjC+c2h6 5.01E+10 0.0 10400.0
2760. pbz+ac3h5=pbzjA+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2761. pbz+ac3h5=pbzjB+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2762. pbz+ac3h5=pbzjC+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2763. pbz+tc3h5=pbzjA+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2764. pbz+tc3h5=pbzjB+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2765. pbz+tc3h5=pbzjC+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2766. pbz+sc3h5=pbzjA+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2767. pbz+sc3h5=pbzjB+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2768. pbz+sc3h5=pbzjC+c3h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2769. pbz+c6h5=pbzjA+c6h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2770. pbz+c6h5=pbzjB+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2771. pbz+c6h5=pbzjC+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
2772. pbz+phch2=pbzjA+toluen 7.94E+11 0.0 20500.0
2773. pbz+phch2=pbzjB+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
2774. pbz+phch2=pbzjC+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
2775. pbz+Bphc2h4=pbzjA+phc2h5 7.94E+11 0.0 2050.0
2776. pbz+Bphc2h4=pbzjB+phc2h5 7.94E+11 0.0 1620.0
2777. pbz+Bphc2h4=pbzjC+phc2h5 7.94E+11 0.0 1620.0
2778. pbz+ch3o=pbzjA+ch3oh 3.18E+11 0.0 7050.0
2779. pbz+ch3o=pbzjB+ch3oh 7.20E+10 0.0 4470.0
2780. pbz+ch3o=pbzjC+ch3oh 7.20E+10 0.0 4470.0
2781. pbzjB=BPHPROPY 2.00E+11 0.0 20000.0
2782. pbzjA=phch2+c2h4 2.00E+13 0.0 12836.0
2783. pbzjB=c6h5+c3h6 2.00E+13 0.0 35390.0
2784. pbzjC=styren+ch3 1.00E+14 0.0 34860.0
2785. BPHPROPY=styren+ch3 1.00E+14 0.0 24000.0
2786. pbzjB+o=phch2+ch3hco 1.60E+13 0.0 0.0
2787. pbzjB+oh=toluen+ch3hco 1.60E+13 0.0 0.0
2788. pbzjB+ho2=>phch2+ch3hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2789. pbzjC+o=phhco+c2h5 1.60E+13 0.0 0.0
2790. pbzjC+oh=phhco+c2h6 1.60E+13 0.0 0.0
2791. pbzjC+ho2=>phhco+c2h5+oh 5.00E+12 0.0 0.0
2792. phc3h5-1=phch2+c2h3 8.00E+15 0.0 88500.0
2793. phc3h5-1=phc3h4+h 1.40E+15 0.0 86250.0
2794. phc3h5-1+h=phc3h4+h2 2.63E+14 0.0 8820.0
2795. phc3h5-1+o=phc3h4+oh 4.00E+11 0.7 -2100.0
2796. phc3h5-1+oh=phc3h4+h2o 3.12E+06 2.0 -1300.0
2797. phc3h5-1+ho2=phc3h4+h2o2 2.66E+11 0.0 11270.0
2798. phc3h5-1+o2=phc3h4+ho2 1.95E+12 0.0 38000.0
2799. phc3h5-1+ch3=phc3h4+ch4 1.90E+12 0.0 9010.0
2800. phc3h5-1+c6h5=phc3h4+c6h6 2.80E+12 0.0 11220.0
2801. phc3h5-1+phch2=phc3h4+toluen 2.80E+12 0.0 11220.0
2802. phc3h5-1+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5 2.80E+12 0.0 11220.0
2803. phc3h5-1+h=c6h6+ac3h5 2.40E+13 0.0 5123.0
2804. phc3h5-1+ho2=>Aphc2h4+hco+oh 2.50E+12 1.0 25000.0
2805. phc3h5-1+ho2=>phch2co+ch3+oh 2.50E+12 1.0 25000.0
2806. phc3h5-1+o=styren+ch2o 7.02E+07 1.6 -1628.0
2807. phc3h5-1+o=phhco+c2h4 4.69E+07 1.6 -1628.0
2808. phc3h5-1+oh=>Aphc2h4+ch2o 1.00E+12 0.0 0.0
2809. phc3h5-1+oh=>phch2hco+ch3 1.00E+12 0.0 0.0

2810. phc3h5-2=ASTYRYL+ch3 3.00E+17 0.0 99000.0
2811. phc3h5-2=c6h5+sc3h5 8.00E+15 0.0 163800.0
2812. phc3h5-2=phc3h4+h 2.10E+15 0.0 88230.0
2813. phc3h5-2+h=phc3h4+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
2814. phc3h5-2+o=phc3h4+oh 1.75E+11 0.7 5884.0
2815. phc3h5-2+oh=phc3h4+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
2816. phc3h5-2+ho2=phc3h4+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
2817. phc3h5-2+o2=phc3h4+ho2 1.95E+12 0.0 39000.0
2818. phc3h5-2+ch3=phc3h4+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2819. phc3h5-2+c6h5=phc3h4+c6h6 2.80E+12 0.0 11220.0
2820. phc3h5-2+phch2=phc3h4+toluen 2.80E+12 0.0 11220.0
2821. phc3h5-2+Aphc2h4=phc3h4+phc2h5 2.80E+12 0.0 11220.0
2822. phc3h5-2+o=phhco+c2h4 7.00E+07 1.6 -628.0
2823. phc3h5-2+o=styren+ch2o 4.70E+07 1.6 -628.0
2824. phc3h5-2+oh=>phhco+c2h5 2.60E+13 0.0 0.0
2825. phc3h5-2+oh=>phch2+ch3hco 2.60E+13 0.0 0.0
2826. phc3h5-2+oh=Cphc3h5ohB 4.75E+12 0.0 -782.0
2827. phc3h5-2+oh=Bphc3h5ohC 4.75E+12 0.0 -782.0
2828. phc3h4+ho2=Cophc3h4-1+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
2829. phc3h4+ho2=Aophc3h4-2+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
2830. phc3h4+ch3o2=Cophc3h4-1+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
2831. phc3h4+ch3o2=Aophc3h4-2+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
2832. phc3h4+c2h5o2=Cophc3h4-1+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
2833. phc3h4+c2h5o2=Aophc3h4-2+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
2834. phc3h4+o2=phhco+ch2hco 1.06E+10 0.3 12838.0
2835. Cophc3h4-1=phhco+c2h3 7.94E+14 0.0 19000.0
2836. Aophc3h4-2=ch2o+ASTYRYL 7.94E+14 0.0 19000.0
2837. Cphc3h5ohB+o2=pbzohBqjC 4.58E+11 0.0 -378.0
2838. Bphc3h5ohC+o2=pbzohCqjB 2.00E+12 0.0 0.0
2839. Bphc3h5ohA+o2=pbzohAqjB 2.00E+12 0.0 0.0
2840. Aphc3h5ohB+o2=pbzohBqjA 2.00E+12 0.0 0.0
2841. pbzohBqjC=phhco+ch3hco+oh 1.00E+16 0.0 25000.0
2842. pbzohCqjB=phhco+ch3hco+oh 1.00E+16 0.0 25000.0
2843. pbzohAqjB=phch2hco+ch2o+oh 1.00E+16 0.0 25000.0
2844. pbzohBqjA=phch2hco+ch2o+oh 1.00E+16 0.0 25000.0
2845. phc2h4hco+o2=>phc2h4co+ho2 2.00E+13 0.5 42200.0
2846. phc2h4hco+ho2=>phc2h4co+h2o2 1.70E+12 0.0 10700.0
2847. phc2h4hco+oh=>phc2h4co+h2o 2.35E+10 0.7 -1113.0
2848. phc2h4hco+o=>phc2h4co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
2849. phc2h4hco+h=>phc2h4co+h2 5.54E+02 3.5 5167.0
2850. phc2h4hco+ch3=>phc2h4co+ch4 2.25E+00 4.0 8285.0
2851. phc2h4hco=>Aphc2h4+hco 5.00E+16 0.0 72250.0
2852. phc2h4co=Aphc2h4+co 8.00E+13 0.0 30000.0
2853. phc2h4co+ho2=>Aphc2h4+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
2854. phch2coch2=phch2+ch2co 4.00E+13 0.0 13500.0
2855. phcoc2h4=phco+c2h4 4.00E+13 0.0 27870.0
2856. phcoc2h4+o2=phcoc2h3+ho2 5.00E+12 0.0 5000.0
2857. phcoc2h3=>phco+c2h3 1.22E+23 -2.0 83950.0
2858. phcoc2h3=>c6h5+c2h3co 1.22E+23 -2.0 83950.0
2859. phch2+phch2=c14h14 2.51E+11 0.4 0.0
2860. c5h5+c5h5=napht+h2 1.00E+13 0.0 7000.0
2861. c5h5+c5h5=napht+h+h 2.00E+13 0.0 4000.0
2862. A1c2h3AC=napht+h 1.00E+10 0.0 4780.1
2863. phch2+c3h3=c10h10 1.00E+10 0.0 0.0
2864. napht+h=c10h9 5.00E+14 0.0 5000.0
2865. napht=A2-X+h 4.50E+15 0.0 107433.1
2866. napht+h=A2-X+h2 2.50E+14 0.0 15999.0
2867. napht+oh=A2-X+h2o 1.63E+08 1.4 1450.8
2868. napht+ch3=A2-X+ch4 2.00E+12 0.0 15060.0
2869. napht+o=A2O+h 2.23E+13 0.0 4530.7
2870. napht+o=A2-X+oh 2.00E+13 0.0 14704.0

2871. napht+o2=A2-X+ho2 6.30E+13 0.0 60000.0
2872. A2-X+ho2=A2O+oh 5.00E+13 0.0 999.0
2873. A2-X+o2=A2O+o 2.09E+12 0.0 7468.9
2874. A2-X+oh=A2O+h 5.00E+13 0.0 0.0
2875. A2O+h=A2oh 5.06E+14 0.0 0.0
2876. A2O=>indenyl+co 7.40E+11 0.0 43853.0
2877. A2oh+oh=A2O+h2o 3.00E+13 0.0 0.0
2878. A2oh+h=A2O+h2 1.15E+14 0.0 12399.6
2879. A2oh+h=napht+oh 2.23E+13 0.0 7927.8
2880. A2oh+o=A2O+oh 1.26E+13 0.0 2899.1
2881. c10h10+oh=c10h9+h2o 5.00E+06 2.0 0.0
2882. c10h10+o=c10h9+oh 7.00E+11 0.7 6000.0
2883. c10h10+h=c10h9+h2 2.00E+05 2.5 2500.0
2884. c10h9+h=c10h10 1.00E+14 0.0 0.0
2885. c6h4c2h3+c2h2=A1c2h3AC 5.00E+12 0.0 0.0
2886. aceton=ch3co+ch3 2.70E+16 0.0 81740.0
2887. aceton+o2=ch2coch3+ho2 1.00E+13 0.0 51000.0
2888. metacrol=tc3h5+hco 2.45E+16 0.0 84128.0
2889. metacrol+ho2=>c3h5co+h2o2 8.50E+11 0.0 10700.0
2890. metacrol+oh=>c3h5co+h2o 1.21E+13 0.0 -307.0
2891. metacrol+h=>c3h5co+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
2892. metacrol+ch3=>c3h5co+ch4 8.75E+11 0.0 8440.0
2893. c3h5co+m=>tc3h5+co+m 8.64E+15 0.0 14400.0
2894. ic4h9=c3h6+ch3 2.00E+13 0.0 29950.0
2895. ic4h9=ic4h8+h 1.91E+29 -5.2 39758.0
2896. ic4h9+o2=ic4h8+ho2 2.40E+10 0.0 0.0
2897. ic4h9+ho2=>ic3h7+ch2o+oh 2.41E+13 0.0 0.0
2898. tc4h9=ic4h8+h 2.90E+51 -11.5 52620.0
2899. tc4h9=c3h6+ch3 3.00E+14 0.0 46300.0
2900. tc4h9+o2=ic4h8+ho2 5.00E+11 0.0 2500.0
2901. tc4h9+ho2=>aceton+ch3+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2902. tc4h9+oh=ic4h8+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
2903. tc4h9+h=ic4h8+h2 5.40E+12 0.0 0.0
2904. tc4h9+o=ic4h8+oh 4.16E+14 0.0 0.0
2905. tc4h9+o=aceton+ch3 1.04E+14 0.0 0.0
2906. tc4h9+ch3=ic4h8+ch4 1.26E+13 0.0 -596.0
2907. ic4h8=tc3h5+ch3 3.56E+56 -12.0 116658.0
2908. ic4h8=ic4h7+h 2.77E+54 -11.7 107716.0
2909. ic4h8+o2=ic4h7+ho2 1.44E+13 0.0 38530.0
2910. ic4h8+ho2=ic4h7+h2o2 3.00E+11 0.0 14190.0
2911. ic4h8+ho2=c4h8o+oh 1.02E+12 0.0 14964.0
2912. c4h8o=bmepral 4.00E+13 0.0 57200.0
2913. c4h8o=ic3h7+hco 6.00E+13 0.0 57200.0
2914. ic4h8+oh=ic4h7+h2o 6.00E+06 2.0 -60.0
2915. ic4h8+o=ic4h7+oh 3.00E+08 1.3 -1079.0
2916. ic4h8+o=ic3h7+hco 5.00E+08 1.3 -1079.0
2917. ic4h8+o=c4h8o 1.00E+08 1.3 -1079.0
2918. ic4h8+h=ic4h7+h2 1.72E+14 0.0 8000.0
2919. ic4h8+h=c3h6+ch3 1.72E+13 0.0 3600.0
2920. ic4h8+ch3=ic4h7+ch4 4.42E+00 3.5 4420.0
2921. ic4h8+hco=ic4h7+ch2o 3.30E+11 0.0 6210.0
2922. ic4h8+c2h3=ic4h7+c2h4 1.00E+13 0.0 13000.0
2923. ic4h8+ac3h5=ic4h7+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2924. ic4h8+sc3h5=ic4h7+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2925. ic4h8+tc3h5=ic4h7+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
2926. ic4h7+ho2=c4h7o+oh 4.50E+12 0.0 0.0
2927. ic4h7+ch3=bme1bu 1.00E+13 0.0 0.0
2928. ic4h7+ic4h7=ac3h4+bme1bu 5.00E+10 0.0 6300.0
2929. c4h7o=metacrol+h 1.50E+13 0.0 19000.0
2930. bmepral=ic3h7+hco 2.45E+16 0.0 84128.0
2931. bmepral+o2=>bmepryl+ho2 3.01E+13 0.0 39148.0

2932. bmepral+ho2=>bmepryl+h2o2 3.01E+12 0.0 11923.0
2933. bmepral+oh=>bmepryl+h2o 3.37E+12 0.0 -616.0
2934. bmepral+o=>bmepryl+oh 5.00E+12 0.0 1792.0
2935. bmepral+h=>bmepryl+h2 4.00E+13 0.0 4207.0
2936. bmepryl+M=>ic3h7+co+M 8.64E+15 0.0 14400.0
2937. bme1bu=bme2bu 3.50E+12 0.0 60000.0
2938. bme1bu=tc3h5+c2h5 3.30E+21 -1.2 97720.0
2939. bme1bu=bme2b1+h 4.08E+18 -1.0 97350.0
2940. bme1bu+o2=bme2b1+ho2 4.00E+12 0.0 40000.0
2941. bme1bu+ho2=bme2b1+h2o2 1.00E+11 0.0 17060.0
2942. bme1bu+oh=bme2b1+h2o 6.28E+06 2.0 -543.0
2943. bme1bu+o=bme2b1+oh 1.30E+12 0.0 4500.0
2944. bme1bu+h=bme2b1+h2 1.95E+13 0.0 4445.0
2945. bme1bu+ch3=bme2b1+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
2946. bme2bu=bme2b1+h 2.13E+47 -9.3 104551.0
2947. bme2bu=cme2b1+h 1.06E+47 -9.3 104551.0
2948. bme2bu+o2=bme2b1+ho2 4.80E+12 0.0 38530.0
2949. bme2bu+o2=cme2b1+ho2 2.40E+12 0.0 38530.0
2950. bme2bu+ho2=bme2b1+h2o2 3.00E+11 0.0 14190.0
2951. bme2bu+ho2=cme2b1+h2o2 1.50E+11 0.0 14190.0
2952. bme2bu+oh=bme2b1+h2o 9.00E+06 2.0 -60.0
2953. bme2bu+oh=cme2b1+h2o 3.00E+06 2.0 -60.0
2954. bme2bu+oh=ch3hco+ic3h7 2.00E+10 0.0 4000.0
2955. bme2bu+o=bme2b1+oh 3.50E+11 0.7 5884.0
2956. bme2bu+o=cme2b1+oh 1.75E+11 0.7 5884.0
2957. bme2bu+o=ch3hco+c3h6 7.23E+05 2.3 -1050.0
2958. bme2bu+h=bme2b1+h2 1.29E+13 0.0 4445.0
2959. bme2bu+h=cme2b1+h2 6.46E+12 0.0 4445.0
2960. bme2bu+ch3=bme2b1+ch4 3.20E+11 0.0 8800.0
2961. bme2bu+ch3=cme2b1+ch4 1.60E+11 0.0 8800.0
2962. bme2b1=isope+h 1.20E+08 2.5 45000.0
2963. bme2b1+o2=isope+ho2 1.00E+11 0.0 37000.0
2964. bme2b1+ho2=isope+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
2965. bme2b1+oh=isope+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
2966. bme2b1+o=isope+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2967. bme2b1+h=isope+h2 3.60E+12 0.0 0.0
2968. bme2b1+ch3=isope+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
2969. bme2b1+ic4h7=isope+ic4h8 4.00E+13 0.0 0.0
2970. cme2b1=isope+h 1.20E+08 2.5 45000.0
2971. cme2b1+o2=isope+ho2 1.00E+11 0.0 37000.0
2972. cme2b1+ho2=isope+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
2973. cme2b1+oh=isope+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
2974. cme2b1+o=isope+oh 1.80E+13 0.0 0.0
2975. cme2b1+h=isope+h2 3.60E+12 0.0 0.0
2976. cme2b1+ch3=isope+ch4 1.00E+13 0.0 0.0
2977. cme2b1+ic4h7=isope+ic4h8 4.00E+13 0.0 0.0
2978. c2h3+tc3h5=isope 2.50E+13 0.0 0.0
2979. c4h7o=tc3h5+ch2o 5.00E+15 0.0 25000.0
2980. c4h7o=ac3h5+ch2o 1.50E+15 0.0 25000.0
2981. ic4h8+ch3=bme1bu+h 1.55E+07 1.9 14182.0
2982. bme1bu+h=c3h6+c2h5 1.70E+12 0.0 2900.0
2983. bme1bu+ch3=>c2h4+c2h4+c2h5 1.70E+11 0.0 7400.0
2984. nec5h11=ch3+ic4h8 7.94E+13 0.0 30900.0
2985. nec5h11+ho2=>tc4h9+ch2o+oh 2.50E+13 0.0 0.0
2986. nec5h11+o=>tc4h9+ch2o 5.00E+13 0.0 0.0
2987. nec5h11+oh=>tc4h9+ch2o+h 2.50E+13 0.0 0.0
2988. nec5h11+ch3=>tc4h9+c2h5 1.00E+11 0.0 0.0
2989. tc3h5+ho2=ch2co+ch3+oh 1.50E+12 0.0 0.0
2990. tc3h5+ch2=c4h6+h 3.00E+13 0.0 0.0
2991. ic8h18=nec5h11+ic3h7 1.00E+17 0.0 83200.0
2992. ic8h18=dddmpe2+ch3 2.00E+17 0.0 81500.0

2993. ic8h18=tc4h9+ic4h9 1.00E+17 0.0 79000.0
2994. ic8h18=bddmpe2+ch3 3.00E+17 0.0 80800.0
2995. ic8h18=bbdtmpe1+h 2.00E+16 0.0 100160.0
2996. ic8h18=bbdtmpe3+h 4.40E+15 0.0 95160.0
2997. ic8h18=bddtmpe2+h 2.20E+15 0.0 92760.0
2998. ic8h18=bddtmpe1+h 1.30E+16 0.0 99160.0
2999. ic8h18+o2=bbdtmpe1+ho2 3.75E+13 0.0 50560.0
3000. ic8h18+o2=bbdtmpe3+ho2 2.00E+13 0.0 45600.0
3001. ic8h18+o2=bddtmpe2+ho2 2.00E+13 0.0 43200.0
3002. ic8h18+o2=bddtmpe1+ho2 2.50E+13 0.0 49600.0
3003. ic8h18+ho2=bbdtmpe1+h2o2 1.20E+13 0.0 19400.0
3004. ic8h18+ho2=bbdtmpe3+h2o2 2.44E+12 0.0 17000.0
3005. ic8h18+ho2=bddtmpe2+h2o2 2.16E+12 0.0 14400.0
3006. ic8h18+ho2=bddtmpe1+h2o2 8.04E+12 0.0 19400.0
3007. ic8h18+oh=bbdtmpe1+h2o 2.63E+07 1.8 278.2
3008. ic8h18+oh=bbdtmpe3+h2o 1.34E+06 2.0 -1132.0
3009. ic8h18+oh=bddtmpe2+h2o 1.70E+06 1.9 -1451.0
3010. ic8h18+oh=bddtmpe1+h2o 1.78E+07 1.8 1431.0
3011. ic8h18+o=bbdtmpe1+oh 1.24E+03 3.5 3092.1
3012. ic8h18+o=bbdtmpe3+oh 1.13E+03 3.3 1653.3
3013. ic8h18+o=bddtmpe2+oh 2.51E+08 1.1 1631.5
3014. ic8h18+o=bddtmpe1+oh 8.28E+02 3.5 3092.1
3015. ic8h18+h=bbdtmpe1+h2 8.40E+07 2.0 7700.0
3016. ic8h18+h=bbdtmpe3+h2 9.10E+06 2.0 5000.0
3017. ic8h18+h=bddtmpe2+h2 5.00E+13 0.0 7300.0
3018. ic8h18+h=bddtmpe1+h2 5.60E+07 2.0 7700.0
3019. ic8h18+ch3=bbdtmpe1+ch4 1.95E+12 0.0 11600.0
3020. ic8h18+ch3=bbdtmpe3+ch4 4.00E+11 0.0 9500.0
3021. ic8h18+ch3=bddtmpe2+ch4 1.00E+11 0.0 7900.0
3022. ic8h18+ch3=bddtmpe1+ch4 1.30E+12 0.0 11600.0
3023. ic8h18+c2h5=bbdtmpe1+c2h6 1.50E+11 0.0 13400.0
3024. ic8h18+c2h5=bbdtmpe3+c2h6 5.00E+10 0.0 10400.0
3025. ic8h18+c2h5=bddtmpe2+c2h6 1.00E+11 0.0 7900.0
3026. ic8h18+c2h5=bddtmpe1+c2h6 1.00E+11 0.0 13400.0
3027. ic8h18+c2h3=bbdtmpe1+c2h4 1.50E+12 0.0 18000.0
3028. ic8h18+c2h3=bbdtmpe3+c2h4 4.00E+11 0.0 16800.0
3029. ic8h18+c2h3=bddtmpe2+c2h4 2.00E+11 0.0 14300.0
3030. ic8h18+c2h3=bddtmpe1+c2h4 1.00E+12 0.0 18000.0
3031. ic8h18+tc3h5=bbdtmpe1+c3h6 1.50E+12 0.0 18000.0
3032. ic8h18+tc3h5=bbdtmpe3+c3h6 4.00E+11 0.0 16800.0
3033. ic8h18+tc3h5=bddtmpe2+c3h6 2.00E+11 0.0 14300.0
3034. ic8h18+tc3h5=bddtmpe1+c3h6 1.00E+12 0.0 18000.0
3035. ic8h18+ac3h5=bbdtmpe1+c3h6 1.50E+12 0.0 18000.0
3036. ic8h18+ac3h5=bbdtmpe3+c3h6 4.00E+11 0.0 16800.0
3037. ic8h18+ac3h5=bddtmpe2+c3h6 2.00E+11 0.0 14300.0
3038. ic8h18+ac3h5=bddtmpe1+c3h6 1.00E+12 0.0 18000.0
3039. ic8h18+ic4h7=bbdtmpe1+ic4h8 1.50E+12 0.0 18000.0
3040. ic8h18+ic4h7=bbdtmpe3+ic4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
3041. ic8h18+ic4h7=bddtmpe2+ic4h8 2.00E+11 0.0 14300.0
3042. ic8h18+ic4h7=bddtmpe1+ic4h8 1.00E+12 0.0 18000.0
3043. ic8h18+pc4h9=bbdtmpe1+c4h10 1.50E+11 0.0 13400.0
3044. ic8h18+pc4h9=bbdtmpe3+c4h10 5.00E+10 0.0 10400.0
3045. ic8h18+pc4h9=bddtmpe2+c4h10 1.00E+11 0.0 7900.0
3046. ic8h18+pc4h9=bddtmpe1+c4h10 1.00E+11 0.0 13400.0
3047. ic8h18+ch3o=bbdtmpe1+ch3oh 4.75E+11 0.0 7000.0
3048. ic8h18+ch3o=bbdtmpe3+ch3oh 1.10E+12 0.0 5000.0
3049. ic8h18+ch3o=bddtmpe2+ch3oh 1.90E+10 0.0 2800.0
3050. ic8h18+ch3o=bddtmpe1+ch3oh 3.20E+11 0.0 7000.0
3051. dddmpe2=c3h6+tc4h9 5.00E+12 0.0 28400.0
3052. dddmpe2=dddm1pe+h 3.00E+13 0.0 35350.0
3053. dddmpe2=dddm2pe+h 3.00E+13 0.0 38500.0

3054. dddmpe2+o2=dddm1pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
3055. dddmpe2+o2=dddm2pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
3056. dddmpe2+ho2=dddm1pe+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3057. dddmpe2+ho2=dddm2pe+h2o2 1.00E+12 0.0 2000.0
3058. dddmpe2+oh=dddm1pe+h2o 1.20E+13 0.0 0.0
3059. dddmpe2+oh=dddm2pe+h2o 2.40E+13 0.0 0.0
3060. dddmpe2+o=dddm1pe+oh 3.33E+13 0.0 0.0
3061. dddmpe2+o=dddm2pe+oh 5.00E+13 0.0 0.0
3062. dddmpe2+h=dddm1pe+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3063. dddmpe2+h=dddm2pe+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3064. dddmpe2+ch3=dddm1pe+ch4 8.00E+11 0.0 0.0
3065. dddmpe2+ch3=dddm2pe+ch4 1.00E+12 0.0 0.0
3066. dddmpe2+c2h3=dddm1pe+c2h4 1.60E+12 0.0 0.0
3067. dddmpe2+c2h3=dddm2pe+c2h4 1.00E+12 0.0 0.0
3068. dddmpe2+c2h5=dddm1pe+c2h6 1.60E+12 0.0 0.0
3069. dddmpe2+c2h5=dddm2pe+c2h6 1.00E+12 0.0 0.0
3070. dddmpe2+ic4h7=dddm1pe+ic4h8 1.00E+12 0.0 0.0
3071. dddmpe2+ic4h7=dddm2pe+ic4h8 1.00E+12 0.0 0.0
3072. dddmpe2+Cc4h7-1=dddm1pe+c4h8 1.00E+12 0.0 0.0
3073. dddmpe2+Cc4h7-1=dddm2pe+c4h8 1.00E+12 0.0 0.0
3074. bddmpe2=ic4h8+ic3h7 5.00E+12 0.0 28400.0
3075. bddmpe2=bddm1pe+h 3.00E+13 0.0 37270.0
3076. bddmpe2=bddm2pe+h 3.00E+13 0.0 34800.0
3077. bddmpe2+o2=bddm1pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
3078. bddmpe2+o2=bddm2pe+ho2 2.00E+12 0.0 5000.0
3079. bddmpe2+ho2=bddm1pe+h2o2 1.81E+13 0.0 0.0
3080. bddmpe2+ho2=bddm2pe+h2o2 1.81E+13 0.0 0.0
3081. bddmpe2+oh=bddm1pe+h2o 1.21E+13 0.0 0.0
3082. bddmpe2+oh=bddm2pe+h2o 1.80E+13 0.0 0.0
3083. bddmpe2+o=bddm1pe+oh 1.21E+14 0.0 0.0
3084. bddmpe2+o=bddm2pe+oh 1.81E+14 0.0 0.0
3085. bddmpe2+h=bddm1pe+h2 3.61E+12 0.0 0.0
3086. bddmpe2+h=bddm2pe+h2 5.42E+12 0.0 0.0
3087. bddmpe2+ch3=bddm1pe+ch4 8.40E+12 0.0 -596.0
3088. bddmpe2+ch3=bddm2pe+ch4 1.26E+13 0.0 -596.0
3089. bddmpe2+ic4h7=bddm1pe+ic4h8 8.40E+12 0.0 -596.0
3090. bddmpe2+ic4h7=bddm2pe+ic4h8 1.26E+13 0.0 -596.0
3091. bddmpe2+c2h3=bddm1pe+c2h4 1.46E+14 -0.8 0.0
3092. bddmpe2+c2h3=bddm2pe+c2h4 2.20E+14 -0.8 0.0
3093. bbdtmpe1=ic4h8+ic4h9 5.00E+12 0.0 28000.0
3094. bbdtmpe1=bddm1pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
3095. bbdtmpe3=dddm2pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
3096. bbdtmpe3=bddm2pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
3097. bddtmpe2=tc4h9+ic4h8 5.00E+13 0.0 34500.0
3098. bddtmpe1=dddm1pe+ch3 2.00E+13 0.0 31000.0
3099. bddtmpe1=nec5h11+c3h6 1.30E+13 0.0 29500.0
3100. bbdtmpe1=bddtmpe2 1.00E+11 0.0 16100.0
3101. bbdtmpe1=bddtmpe1 6.00E+11 0.0 14100.0
3102. bbdtmpe3+o2=i2c8h16+ho2 5.00E+11 0.0 5000.0
3103. bbdtmpe2+o2=i2c8h16+ho2 1.00E+12 0.0 5000.0
3104. bbdtmpe2+o2=i1c8h16+ho2 1.00E+12 0.0 5000.0
3105. bbdtmpe1+o2=i1c8h16+ho2 1.00E+12 0.0 5000.0
3106. bbdtmpe3+ho2=i2c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3107. bbdtmpe2+ho2=i2c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3108. bbdtmpe2+ho2=i1c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3109. bbdtmpe1+ho2=i1c8h16+h2o2 1.00E+12 0.0 0.0
3110. bbdtmpe3+oh=i2c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
3111. bbdtmpe2+oh=i2c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
3112. bbdtmpe2+oh=i1c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
3113. bbdtmpe1+oh=i1c8h16+h2o 2.00E+13 0.0 0.0
3114. bbdtmpe3+o=i2c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
3115. bddtmpe2+o=i2c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
3116. bddtmpe2+o=i1c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
3117. bddtmpe1+o=i1c8h16+oh 3.00E+13 0.0 0.0
3118. bbdtmpe3+h=i2c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3119. bddtmpe2+h=i2c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3120. bddtmpe2+h=i1c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3121. bddtmpe1+h=i1c8h16+h2 5.00E+13 0.0 0.0
3122. bbdtmpe3=i2c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
3123. bddtmpe2=i2c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
3124. bddtmpe2=i1c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
3125. bddtmpe1=i1c8h16+h 1.00E+13 0.0 38000.0
3126. i1c8h16+h=ic8h15+h2 3.70E+13 0.0 3900.0
3127. i1c8h16+o=ic8h15+oh 3.70E+13 0.0 3900.0
3128. i1c8h16+oh=ic8h15+h2o 3.70E+13 0.0 3900.0
3129. i1c8h16+ch3=ic8h15+ch4 2.00E+12 0.0 7300.0
3130. i1c8h16+ic4h7=ic8h15+ic4h8 2.00E+12 0.0 7300.0
3131. i1c8h16+oh=aceton+nec5h11 1.00E+11 0.0 -4000.0
3132. i2c8h16+h=ic8h15+h2 3.70E+13 0.0 3900.0
3133. i2c8h16+o=ic8h15+oh 3.70E+13 0.0 3900.0
3134. i2c8h16+oh=ic8h15+h2o 3.70E+13 0.0 3900.0
3135. i2c8h16+ch3=ic8h15+ch4 2.00E+12 0.0 7300.0
3136. i2c8h16+ic4h7=ic8h15+ic4h8 2.00E+12 0.0 7300.0
3137. i2c8h16+oh=ch2o+pc7h15 1.00E+11 0.0 -4000.0
3138. i2c8h16+o=>ch2o+nec5h11+c2h3 1.00E+11 0.0 -1050.0
3139. ic8h15=ic4h8+ic4h7 4.51E+24 -3.0 54010.0
3140. ic8h15+o2=>ic4h7+ic4h7+ho2 2.00E+12 0.0 15000.0
3141. ic8h15+o2=>aceton+ic4h7+ch2o 1.00E+13 0.0 -250.0
3142. pc7h15=tc4h9+c3h6 3.52E+21 -2.2 28120.0
3143. pc7h15=>ic4h8+c3h6+h 3.32E+15 -0.5 38750.0
Declared duplicate reaction...
3144. pc7h15=>ic4h8+c3h6+h 2.78E+15 -0.7 38200.0
Declared duplicate reaction...
3145. i1c8h16=nec5h11+tc3h5 2.50E+16 0.0 71000.0
3146. i1c8h16=ch3+dddm1pe2 2.50E+16 0.0 71000.0
3147. i2c8h16=ic4h7+tc4h9 2.50E+16 0.0 71000.0
3148. i2c8h16=ch3+dddm2pe2 2.50E+16 0.0 71000.0
3149. bddm1pe=ic4h7+ic3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
3150. bddm1pe=ic4h9+tc3h5 1.00E+16 0.0 97900.0
3151. bddm1pe=bddm1pe3+h 1.26E+15 0.0 81630.0
3152. bddm1pe=dm2my1pe+h 5.00E+16 0.0 88000.0
3153. bddm1pe+o2=bddm1pe3+ho2 2.00E+13 0.0 33140.0
3154. bddm1pe+o2=dm2my1pe+ho2 1.25E+13 0.0 37530.0
3155. bddm1pe+ho2=bddm1pe3+h2o2 2.44E+12 0.0 17000.0
3156. bddm1pe+ho2=dm2my1pe+h2o2 4.00E+12 0.0 19400.0
3157. bddm1pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
3158. oc7h14=>tc3h5+ic3h7+ch2o 6.00E+13 0.0 57200.0
3159. bddm1pe+oh=bddm1pe3+h2o 4.70E+07 1.6 -35.0
3160. bddm1pe+oh=dm2my1pe+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
3161. bddm1pe+oh=>ic3h7+tc3h5+ch2oh 7.00E+11 0.0 -928.0
3162. bddm1pe+o=bddm1pe3+oh 4.70E+05 2.5 2230.0
3163. bddm1pe+o=dm2my1pe+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
3164. bddm1pe+o=>ac3h5+ic3h7+ch2o 1.00E+08 1.4 530.0
3165. bddm1pe+o=>c3h6+ic3h7+hco 1.00E+08 1.4 530.0
3166. bddm1pe+h=bddm1pe3+h2 9.10E+06 2.0 5000.0
3167. bddm1pe+h=dm2my1pe+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
3168. bddm1pe+ch3=bddm1pe3+ch4 4.00E+11 0.0 9500.0
3169. bddm1pe+ch3=dm2my1pe+ch4 6.60E+11 0.0 11600.0
3170. bddm1pe+c2h3=bddm1pe3+c2h4 4.00E+11 0.0 16800.0
3171. bddm1pe+c2h3=dm2my1pe+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
3172. bddm1pe+c2h5=bddm1pe3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
3173. bddm1pe+c2h5=dm2my1pe+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
3174. bddm1pe+Cc4h7-1=bddm1pe3+c4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
3175. bddm1pe+Cc4h7-1=dm2my1pe+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
3176. bddm1pe+M=bddm1pe1+h+M 1.50E+17 0.0 96560.0
3177. bddm1pe+o2=bddm1pe1+ho2 2.00E+13 0.0 61500.0
3178. bddm1pe+oh=bddm1pe1+h2o 1.00E+13 0.0 5936.0
3179. bddm1pe+o=bddm1pe1+oh 1.20E+11 0.7 7633.0
3180. bddm1pe+h=bddm1pe1+h2 5.00E+13 0.0 15000.0
3181. bddm1pe+ch3=bddm1pe1+ch4 4.50E+12 0.0 11128.0
3182. bddm1pe+c2h3=bddm1pe1+c2h4 4.50E+12 0.0 16000.0
3183. bddm1pe+ac3h5=bddm1pe1+c3h6 4.50E+12 0.0 16000.0
3184. bddm1pe1+o2=>ch3co+ic4h9+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
3185. bddm2pe=bme2pe4+ch3 1.00E+16 0.0 71000.0
3186. bddm2pe=bddm2pe1+h 1.00E+16 0.0 82600.0
3187. bddm2pe=bddm3pe2+h 1.00E+16 0.0 77400.0
3188. bddm2pe+o2=bddm2pe1+ho2 1.25E+13 0.0 28560.0
3189. bddm2pe+o2=bddm3pe2+ho2 2.00E+13 0.0 27800.0
3190. bddm2pe+ho2=bddm2pe1+h2o2 8.00E+11 0.0 19400.0
3191. bddm2pe+ho2=bddm3pe2+h2o2 2.16E+12 0.0 14400.0
3192. bddm2pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
3193. oc7h14=>aceton+ic4h8 6.00E+13 0.0 57200.0
3194. bddm2pe+oh=bddm2pe1+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
3195. bddm2pe+oh=bddm3pe2+h2o 5.73E+10 0.5 63.0
3196. bddm2pe+oh=>aceton+c3h6+ch3 7.00E+11 0.0 -928.0
3197. bddm2pe+o=bddm2pe1+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
3198. bddm2pe+o=bddm3pe2+oh 1.10E+13 0.0 3280.0
3199. bddm2pe+o=>aceton+ic4h8 1.00E+08 1.4 530.0
3200. bddm2pe+o=>c3h6+ic3h7+hco 1.00E+08 1.4 530.0
3201. bddm2pe+h=bddm2pe1+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
3202. bddm2pe+h=bddm3pe2+h2 1.26E+14 0.0 7303.0
3203. bddm2pe+ch3=bddm2pe1+ch4 6.50E+11 0.0 11600.0
3204. bddm2pe+ch3=bddm3pe2+ch4 1.00E+11 0.0 7900.0
3205. bddm2pe+c2h3=bddm2pe1+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
3206. bddm2pe+c2h3=bddm3pe2+c2h4 2.00E+11 0.0 14300.0
3207. bddm2pe+c2h5=bddm2pe1+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
3208. bddm2pe+c2h5=bddm3pe2+c2h6 1.00E+11 0.0 7900.0
3209. bddm2pe+Cc4h7-1=bddm2pe1+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
3210. bddm2pe+Cc4h7-1=bddm3pe2+c4h8 2.00E+11 0.0 14300.0
3211. bddm2pe=bddm2pe3+h 7.50E+16 0.0 96560.0
3212. bddm2pe+o2=bddm2pe3+ho2 1.00E+13 0.0 55100.0
3213. bddm2pe+oh=bddm2pe3+h2o 5.00E+12 0.0 5936.0
3214. bddm2pe+o=bddm2pe3+oh 6.00E+10 0.7 7633.0
3215. bddm2pe+h=bddm2pe3+h2 2.50E+13 0.0 15000.0
3216. bddm2pe+ch3=bddm2pe3+ch4 2.30E+12 0.0 11128.0
3217. bddm2pe+c2h3=bddm2pe3+c2h4 2.30E+12 0.0 16000.0
3218. bddm2pe+ac3h5=bddm2pe3+c3h6 2.30E+12 0.0 16000.0
3219. bddm2pe3+o2=>bmepryl+aceton 4.00E+12 0.0 -250.0
3220. dddm1pe=ac3h5+tc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
3221. dddm1pe=nec5h11+c2h3 1.00E+16 0.0 71000.0
3222. dddm1pe=dddm1pe3+h 1.26E+15 0.0 82400.0
3223. dddm1pe+o2=dddm1pe3+ho2 2.00E+13 0.0 33140.0
3224. dddm1pe+ho2=dddm1pe3+h2o2 2.44E+12 0.0 17000.0
3225. dddm1pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
3226. dddm1pe+oh=dddm1pe3+h2o 4.70E+07 1.6 -35.0
3227. bddm2pe+oh=>ch2o+c2h4+tc4h9 7.00E+11 0.0 -928.0
3228. dddm1pe+o=dddm1pe3+oh 4.70E+05 2.5 2230.0
3229. dddm1pe+o=c2h3+tc4h9+ch2o 1.00E+08 1.4 530.0
3230. dddm1pe+o=c2h4+tc4h9+hco 1.00E+08 1.4 530.0
3231. dddm1pe+h=dddm1pe3+h2 9.10E+06 2.0 5000.0
3232. dddm1pe+ch3=dddm1pe3+ch4 4.00E+11 0.0 9500.0
3233. dddm1pe+c2h3=dddm1pe3+c2h4 4.00E+11 0.0 16800.0
3234. dddm1pe+c2h5=dddm1pe3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
3235. dddm1pe+ac3h5=dddm1pe3+c3h6 4.00E+11 0.0 16800.0
3236. dddm1pe+ic4h7=dddm1pe3+ic4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
3237. dddm1pe+Cc4h7-1=dddm1pe3+c4h8 4.00E+11 0.0 16800.0
3238. dddm1pe+M=dddm1pe2+h+M 2.00E+17 0.0 96560.0
3239. dddm1pe+o2=dddm1pe2+ho2 2.70E+13 0.0 60800.0
3240. dddm1pe+oh=dddm1pe2+h2o 1.40E+13 0.0 5936.0
3241. dddm1pe+o=dddm1pe2+oh 1.60E+11 0.7 7633.0
3242. dddm1pe+h=dddm1pe2+h2 7.00E+13 0.0 15000.0
3243. dddm1pe+ch3=dddm1pe2+ch4 6.00E+12 0.0 11128.0
3244. dddm1pe+c2h3=dddm1pe2+c2h4 6.00E+12 0.0 16000.0
3245. dddm1pe+ac3h5=dddm1pe2+c3h6 6.00E+12 0.0 16000.0
3246. dddm1pe2+o2=>nec5h11+hco+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
3247. dddm2pe=tc4h9+sc3h5 1.00E+16 0.0 71000.0
3248. dddm2pe=dddm2pe1+h 5.00E+16 0.0 80000.0
3249. dddm2pe+o2=dddm2pe1+ho2 1.25E+13 0.0 34660.0
3250. dddm2pe+ho2=dddm2pe1+h2o2 4.80E+12 0.0 38500.0
3251. dddm2pe+ho2=>oc7h14+oh 1.00E+12 0.0 14964.0
3252. oc7h14=>tc4h9+c2h4+hco 6.00E+13 0.0 57200.0
3253. oc7h14=>tc4h9+c2h3+ch2o 6.00E+13 0.0 57200.0
3254. oc7h14=>nec5h11+ch2hco 6.00E+13 0.0 57200.0
3255. dddm2pe+oh=dddm2pe1+h2o 5.25E+09 1.0 1590.0
3256. dddm2pe+oh=>nec5h11+ch3hco 7.00E+11 0.0 -928.0
3257. dddm2pe+o=dddm2pe1+oh 2.20E+06 2.4 5500.0
3258. dddm2pe+o=c2h4+tc4h9+hco 1.00E+08 1.4 530.0
3259. dddm2pe+o=ch3hco+ic4h7+ch3 1.00E+08 1.4 530.0
3260. dddm2pe+o=nec5h11+ch2hco 1.00E+08 1.4 530.0
3261. dddm2pe+h=dddm2pe1+h2 2.80E+07 2.0 7700.0
3262. dddm2pe+ch3=dddm2pe1+ch4 6.50E+11 0.0 11600.0
3263. dddm2pe+c2h3=dddm2pe1+c2h4 5.00E+11 0.0 18000.0
3264. dddm2pe+c2h5=dddm2pe1+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
3265. dddm2pe+ac3h5=dddm2pe1+c3h6 5.00E+11 0.0 18000.0
3266. dddm2pe+ic4h7=dddm2pe1+ic4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
3267. dddm2pe+Cc4h7-1=dddm2pe1+c4h8 5.00E+11 0.0 18000.0
3268. dddm2pe+M=dddm2pe2+h+M 1.50E+17 0.0 96560.0
3269. dddm2pe+o2=dddm2pe2+ho2 2.00E+13 0.0 55500.0
3270. dddm2pe+oh=dddm2pe2+h2o 1.00E+13 0.0 5936.0
3271. dddm2pe+o=dddm2pe2+oh 1.20E+11 0.7 7633.0
3272. dddm2pe+h=dddm2pe2+h2 5.00E+13 0.0 15000.0
3273. dddm2pe+ch3=dddm2pe2+ch4 4.50E+12 0.0 11128.0
3274. dddm2pe+c2h3=dddm2pe2+c2h4 4.50E+12 0.0 16000.0
3275. dddm2pe+ac3h5=dddm2pe2+c3h6 4.50E+12 0.0 16000.0
3276. dddm2pe2+o2=>ch3co+tc4h9+hco 4.00E+12 0.0 -250.0
3277. dddm2pe2+o2=>ch3hco+tc4h9+co 4.00E+12 0.0 -250.0
3278. dddm2pe1+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3279. dddm1pe2=tc4h9+ac3h4 2.50E+13 0.0 45300.0
3280. bddm1pe3=>tc3h5+sc3h5+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0
3281. bddm1pe3+ho2=>metacrol+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3282. bme2pe4=>ic4h7+c2h3+h 2.50E+13 0.0 45300.0
3283. bme2pe4+ho2=>ic4h7+ch3hco+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3284. dddm1pe3=ic4h7+c2h3+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0
3285. dddm1pe3+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3286. dm2my1pe=ic4h9+ac3h4 2.50E+13 0.0 45300.0
3287. dm2my1pe+ho2=>metacrol+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3288. bddm3pe2=ic3h7+c3h3+ch3 2.50E+13 0.0 45300.0
3289. bddm2pe1+ho2=>metacrol+ic3h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3290. bddm3pe2+ho2=>aceton+ic4h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3291. bddm2pe3+ho2=>aceton+ic4h7+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3292. dddm1pe2+ho2=>nec5h11+ch2co+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3293. dddm2pe2+ho2=>acrol+tc4h9+oh 7.50E+11 0.0 0.0
3294. dddm1pe+h=nec5h11+c2h4 7.23E+12 0.0 1302.0
3295. bddm1pe+h=ic4h9+c3h6 7.23E+12 0.0 1302.0

3296.	bddm2pe+h=ic3h7+ic4h8	7.23E+12	0.0	1302.0
3297.	dddm2pe+h=tc4h9+c3h6	7.23E+12	0.0	1302.0
3298.	hxol=h+hxol1j	6.00E+15	0.0	95000.0
3299.	hxol=h+hxol2j	6.00E+15	0.0	98706.0
3300.	hxol=h+hxol3j	6.00E+15	0.0	98706.0
3301.	hxol=h+hxol4j	6.00E+15	0.0	98706.0
3302.	hxol=h+hxol5j	6.00E+15	0.0	98706.0
3303.	hxol=h+hxol6j	9.00E+15	0.0	100906.0
3304.	hxol=h+c6h13ojA	5.60E+13	0.0	103980.5
3305.	hxol=Ac6h13+oh	2.95E+22	-2.2	96578.0
3306.	hxol=Ac5h11+ch2oh	2.30E+16	0.0	86239.6
3307.	hxol=nc3h7+ch2ch2ch2oh	3.80E+16	0.0	85856.1
3308.	hxol=pc4h9+pc2h4oh	1.00E+17	0.0	87176.5
3309.	hxol=c2h5+b1ol4j	2.60E+16	0.0	86538.8
3310.	hxol=ch3+pe1ol5j	4.90E+16	0.0	88409.1
3311.	hxol+o2=ho2+hxol1j	1.40E+10	0.0	45935.0
3312.	hxol+o2=ho2+hxol2j	1.40E+10	0.0	49097.5
3313.	hxol+o2=ho2+hxol3j	1.40E+10	0.0	49097.5
3314.	hxol+o2=ho2+hxol4j	1.40E+10	0.0	49097.5
3315.	hxol+o2=ho2+hxol5j	1.40E+10	0.0	49097.5
3316.	hxol+o2=ho2+hxol6j	2.10E+10	0.0	51296.5
3317.	hxol+o=oh+c6h13ojA	1.46E-03	4.7	1726.9
3318.	hxol+o=oh+hxol1j	1.45E+05	2.5	876.4
3319.	hxol+o=oh+hxol6j	5.10E+13	0.0	7850.0
3320.	hxol+o=oh+hxol5j	2.60E+13	0.0	5200.0
3321.	hxol+o=oh+hxol4j	2.60E+13	0.0	5200.0
3322.	hxol+o=oh+hxol3j	2.60E+13	0.0	5200.0
3323.	hxol+o=oh+hxol2j	2.60E+13	0.0	5200.0
3324.	hxol+h=h2+c6h13ojA	5.53E-23	10.6	-4459.0
3325.	hxol+h=h2+hxol1j	1.79E+05	2.5	3420.0
3326.	hxol+h=h2+hxol6j	2.90E+07	2.0	7700.0
3327.	hxol+h=h2+hxol2j	9.00E+06	2.0	5000.0
3328.	hxol+h=h2+hxol5j	1.30E+06	2.4	4471.0
3329.	hxol+h=h2+hxol4j	1.30E+06	2.4	4471.0
3330.	hxol+h=h2+hxol3j	1.30E+06	2.4	4471.0
3331.	hxol+oh=h2o+c6h13ojA	2.81E+02	3.0	-580.3
3332.	hxol+oh=h2o+hxol1j	1.31E+05	2.4	-1456.6
3333.	hxol+oh=h2o+hxol6j	7.00E+06	1.8	974.0
3334.	hxol+oh=h2o+hxol5j	9.50E+05	2.0	-596.0
3335.	hxol+oh=h2o+hxol4j	1.12E+06	2.0	-1391.0
3336.	hxol+oh=h2o+hxol3j	1.12E+06	2.0	-1391.0
3337.	hxol+oh=h2o+hxol2j	1.12E+06	2.0	-1391.0
3338.	hxol+ho2=h2o2+hxol1j	4.00E+11	0.0	15500.0
3339.	hxol+ho2=h2o2+c6h13ojA	2.50E+12	0.0	24000.0
3340.	hxol+ho2=h2o2+hxol6j	3.60E+04	2.5	16683.0
3341.	hxol+ho2=h2o2+hxol5j	4.00E+04	2.5	14208.0
3342.	hxol+ho2=h2o2+hxol4j	4.00E+04	2.5	14208.0
3343.	hxol+ho2=h2o2+hxol3j	4.00E+04	2.5	14208.0
3344.	hxol+ho2=h2o2+hxol2j	4.00E+04	2.5	14208.0
3345.	hxol+ch3=ch4+c6h13ojA	2.04E+00	3.6	7722.3
3346.	hxol+ch3=ch4+hxol1j	1.99E+01	3.4	7634.8
3347.	hxol+ch3=ch4+hxol6j	3.00E-01	4.0	8200.0
3348.	hxol+ch3=ch4+hxol5j	2.00E+11	0.0	9600.0
3349.	hxol+ch3=ch4+hxol4j	2.00E+11	0.0	9600.0
3350.	hxol+ch3=ch4+hxol3j	2.00E+11	0.0	9600.0
3351.	hxol+ch3=ch4+hxol2j	2.00E+11	0.0	9600.0
3352.	hxol+hco=ch2o+hxol1j	1.00E+07	1.9	17000.0
3353.	hxol+hco=ch2o+c6h13ojA	3.40E+04	2.5	13500.0
3354.	hxol+hco=ch2o+hxol6j	1.00E+05	2.5	18500.0
3355.	hxol+hco=ch2o+hxol5j	1.00E+07	1.9	17000.0
3356.	hxol+hco=ch2o+hxol4j	1.00E+07	1.9	17000.0
3357.	hxol+hco=ch2o+hxol3j	1.00E+07	1.9	17000.0
3358.	hxol+hco=ch2o+hxol2j	1.00E+07	1.9	17000.0
3359.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol1j	6.00E+01	3.0	12000.0
3360.	hxol+ch2oh=ch3oh+c6h13ojA	1.20E+02	2.8	10800.0
3361.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol6j	9.90E+01	3.0	14000.0
3362.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol5j	6.00E+01	3.0	12000.0
3363.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol4j	6.00E+01	3.0	12000.0
3364.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol3j	6.00E+01	3.0	12000.0
3365.	hxol+ch2oh=ch3oh+hxol2j	6.00E+01	3.0	12000.0
3366.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol1j	1.50E+11	0.0	4500.0
3367.	hxol+ch3o=ch3oh+c6h13ojA	2.30E+10	0.0	2900.0
3368.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol6j	1.60E+11	0.0	7300.0
3369.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol5j	1.50E+11	0.0	4500.0
3370.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol4j	1.50E+11	0.0	4500.0
3371.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol3j	1.50E+11	0.0	4500.0
3372.	hxol+ch3o=ch3oh+hxol2j	1.50E+11	0.0	4500.0
3373.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol1j	3.00E+12	0.0	17500.0
3374.	hxol+ch3o2=ch3o2h+c6h13ojA	1.50E+12	0.0	15000.0
3375.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol6j	6.00E+12	0.0	20000.0
3376.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol5j	3.00E+12	0.0	17500.0
3377.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol4j	3.00E+12	0.0	17500.0
3378.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol3j	3.00E+12	0.0	17500.0
3379.	hxol+ch3o2=ch3o2h+hxol2j	3.00E+12	0.0	17500.0
3380.	hxol+c2h5=c2h6+hxol1j	2.00E+11	0.0	11000.0
3381.	hxol+c2h5=c2h6+c6h13ojA	1.00E+11	0.0	9200.0
3382.	hxol+c2h5=c2h6+hxol6j	3.00E+11	0.0	13500.0
3383.	hxol+c2h5=c2h6+hxol5j	2.00E+11	0.0	11000.0
3384.	hxol+c2h5=c2h6+hxol4j	2.00E+11	0.0	11000.0
3385.	hxol+c2h5=c2h6+hxol3j	2.00E+11	0.0	11000.0
3386.	hxol+c2h5=c2h6+hxol2j	2.00E+11	0.0	11000.0
3387.	hxol1j=ch3hco+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700.0
3388.	hxol6j=b1ol4j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3389.	hxol5j=ch2ch2ch2oh+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
3390.	hxol4j=ch3+pe1ol4e	2.00E+13	0.0	31000.0
3391.	hxol3j=c2h5+b1ol3e	2.00E+13	0.0	28700.0
3392.	hxol3j=ch2oh+c5h10	2.00E+13	0.0	28700.0
3393.	hxol2j=nc3h7+c2h3ch2oh	2.00E+13	0.0	28700.0
3394.	oh+c6h12-1=hxol2j	9.93E+11	0.0	-960.0
3395.	c6h13ojA+m=c5h11hco+h+m	1.16E+35	-5.9	25274.0
3396.	hxol1j+m=c5h11hco+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3397.	hxol2j=hxol2e+h	1.20E+13	0.0	35602.0
3398.	hxol2j=c5h11hco+h	1.20E+13	0.0	37412.1
3399.	hxol3j=hxol3e+h	1.20E+13	0.0	34252.1
3400.	hxol3j=hxol2e+h	1.20E+13	0.0	37412.1
3401.	hxol4j=hxol4e+h	1.20E+13	0.0	34322.1
3402.	hxol4j=hxol3e+h	1.20E+13	0.0	34252.1
3403.	hxol5j=hxol4e+h	1.20E+13	0.0	34322.1
3404.	hxol5j=hxol5e+h	1.80E+13	0.0	37082.1
3405.	hxol6j=hxol5e+h	1.20E+13	0.0	34882.3
3406.	hxol1j+o2=c5h11hco+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3407.	c6h13ojA+o2=c5h11hco+ho2	4.00E+10	0.0	1100.0
3408.	hxol6j+o2=hxol5e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3409.	hxol5j+o2=hxol4e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3410.	hxol5j+o2=hxol5e+ho2	8.10E+11	0.0	5000.0
3411.	hxol4j+o2=hxol4e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3412.	hxol4j+o2=hxol3e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3413.	hxol3j+o2=hxol3e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3414.	hxol3j+o2=hxol2e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3415.	hxol2j+o2=hxol2e+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3416.	hxol2j+o2=c5h11hco+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3417.	c6h13ojA+co=co2+Ac6h13	4.68E+02	3.2	5380.0
3418.	c6h13ojA+h=ch2oh+Ac5h11	3.00E+13	0.0	0.0
3419.	c6h13ojA+oh=c5h11hco+h2o	1.00E+13	0.0	0.0
3420.	hxol1j+ho2=c5h11hco+h2o2	4.00E+13	0.0	0.0
3421.	hxol1j+oh=c5h11hco+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3422.	hxol1j+o=c5h11hco+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3423.	hxol1j=hxol4j	3.60E+08	1.1	20372.7
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.02E+08	0.9	17627.9
3424.	hxol1j=hxol5j	9.65E+07	1.0	15138.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.02E+08	1.0	12262.0
3425.	hxol1j=hxol6j	1.97E+07	1.0	21275.8
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.17E+07	1.0	16924.4
3426.	hxol6j=hxol3j	4.57E+08	1.0	18196.5
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.08E+09	1.0	19803.7
3427.	hxol6j=hxol2j	7.93E+07	1.0	12896.5
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.85E+08	1.0	14503.7
3428.	hxol5j=hxol2j	3.70E+08	1.1	18934.1
	Reverse Arrhenius coefficients:	8.79E+08	0.9	19065.9
3429.	hxol1j+o2=hxol1o2	2.43E+39	-9.0	8620.0
3430.	hxol2j+o2=hxol2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3431.	hxol3j+o2=hxol3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3432.	hxol4j+o2=hxol4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3433.	hxol5j+o2=hxol5o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3434.	hxol6j+o2=hxol6o2	4.82E+36	-8.2	5167.0
3435.	oh+c5h11hco=hxol1o	3.00E+15	-1.1	0.0
3436.	Ac5h11+hocho=hxol1o	2.60E+12	0.0	-614.0
3437.	ch2oh+nc4h9hco=hxol2o	1.50E+11	0.0	11900.0
3438.	pc4h9+hoch2hco=hxol2o	1.50E+11	0.0	11900.0
3439.	pc2h4oh+nc3h7hco=hxol3o	1.50E+11	0.0	11900.0
3440.	nc3h7+hoc2h4hco=hxol3o	1.50E+11	0.0	11900.0
3441.	ethco+ch2ch2ch2oh=hxol4o	1.50E+11	0.0	11900.0
3442.	c2h5+b1*o4ol=hxol4o	1.50E+11	0.0	11900.0
3443.	ch3hco+b1ol4j=hxol5o	1.50E+11	0.0	11900.0
3444.	ch2o+pe1ol5j=hxol6o	1.50E+11	0.0	11900.0
3445.	hxol5e+oh=hxol4e6j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3446.	hxol5e+o=hxol4e6j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3447.	hxol5e+h=hxol4e6j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3448.	hxol5e+ch3=hxol4e6j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3449.	hxol5e+ho2=hxol4e6j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3450.	hxol5e+oh=ch2o+pe1ol5j	1.00E+11	0.0	-4000.0
3451.	hxol5e+o=hco+pe1ol5j	1.00E+11	0.0	-1050.0
3452.	hxol5e=ac3h5+ch2ch2ch2oh	8.00E+15	0.0	66425.0
3453.	hxol5e=Dc4h7-1+pc2h4oh	1.00E+17	0.0	86270.0
3454.	hxol5e=Ec5h9-1+ch2oh	1.00E+17	0.0	84640.0
3455.	hxol5e+oh=hxol5e1j+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3456.	hxol5e+o=hxol5e1j+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3457.	hxol5e+h=hxol5e1j+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3458.	hxol5e+ch3=hxol5e1j+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3459.	hxol5e+ho2=hxol5e1j+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3460.	hxol4e+oh=hxol4e6j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3461.	hxol4e+o=hxol4e6j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3462.	hxol4e+h=hxol4e6j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3463.	hxol4e+ch3=hxol4e6j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3464.	hxol4e+ho2=hxol4e6j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3465.	hxol4e+oh=hxol3e5j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3466.	hxol4e+o=hxol3e5j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3467.	hxol4e+h=hxol3e5j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3468.	hxol4e+ch3=hxol3e5j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3469.	hxol4e+ho2=hxol3e5j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3470.	hxol4e+oh=ch3hco+b1ol4j	1.00E+11	0.0	-4000.0
3471.	hxol4e+o=ch2hco+b1ol4j	1.00E+11	0.0	-1050.0
3472.	hxol4e+oh=c2h5+b1*o4ol	1.00E+11	0.0	-4000.0
3473.	hxol4e+o=c2h5+b1j*o4ol	1.00E+11	0.0	-1050.0
3474.	hxol4e=Cc4h7-1+pc2h4oh	8.00E+15	0.0	70550.0
3475.	hxol4e=Ec5h9-2+ch2oh	1.00E+17	0.0	84570.0
3476.	hxol4e+oh=hxol4e1j+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3477.	hxol4e+o=hxol4e1j+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3478.	hxol4e+h=hxol4e1j+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3479.	hxol4e+ch3=hxol4e1j+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3480.	hxol4e+ho2=hxol4e1j+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3481.	hxol3e+oh=hxol2e4j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3482.	hxol3e+o=hxol2e4j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3483.	hxol3e+h=hxol2e4j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3484.	hxol3e+ch3=hxol2e4j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3485.	hxol3e+ho2=hxol2e4j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3486.	hxol3e+oh=hxol3e5j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3487.	hxol3e+o=hxol3e5j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3488.	hxol3e+h=hxol3e5j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3489.	hxol3e+ch3=hxol3e5j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3490.	hxol3e+ho2=hxol3e5j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3491.	hxol3e+oh=ethco+ch2ch2ch2oh	1.00E+11	0.0	-4000.0
3492.	hxol3e+o=c2h5co+ch2ch2ch2oh	1.00E+11	0.0	-1050.0
3493.	hxol3e+oh=nc3h7+hoc2h4hco	1.00E+11	0.0	-4000.0
3494.	hxol3e+o=nc3h7+hoc2h4co	1.00E+11	0.0	-1050.0
3495.	hxol3e=Cc5h9-1+ch2oh	8.00E+15	0.0	71400.0
3496.	hxol3e+oh=hxol3e1j+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3497.	hxol3e+o=hxol3e1j+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3498.	hxol3e+h=hxol3e1j+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3499.	hxol3e+ch3=hxol3e1j+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3500.	hxol3e+ho2=hxol3e1j+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3501.	hxol2e+oh=hxol2e4j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3502.	hxol2e+o=hxol2e4j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3503.	hxol2e+h=hxol2e4j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3504.	hxol2e+ch3=hxol2e4j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3505.	hxol2e+ho2=hxol2e4j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3506.	hxol2e+oh=hxol2e1j+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3507.	hxol2e+o=hxol2e1j+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3508.	hxol2e+h=hxol2e1j+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3509.	hxol2e+ch3=hxol2e1j+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3510.	hxol2e+ho2=hxol2e1j+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3511.	hxol2e+oh=nc3h7hco+pc2h4oh	1.00E+11	0.0	-4000.0
3512.	hxol2e+o=c3h7co+pc2h4oh	1.00E+11	0.0	-1050.0
3513.	hxol2e+oh=pc4h9+hoch2hco	1.00E+11	0.0	-4000.0
3514.	hxol2e+o=pc4h9+hoch2co	1.00E+11	0.0	-1050.0
3515.	hxol2e=c2h5+b1ol2e4j	8.00E+15	0.0	67850.0
3516.	hxol2e=Cc6h11-1+oh	8.00E+15	0.0	78850.0
3517.	hxol5e1j=ch3hco+Dc4h7-1	2.00E+13	0.0	28750.0
3518.	hxol5e1j+m=c5h9hco-1+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3519.	hxol5e1j+o2=c5h9hco-1+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3520.	hxol5e1j+o=c5h9hco-1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3521.	hxol5e1j+ho2=c5h9hco-1+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3522.	hxol5e1j+oh=c5h9hco-1+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3523.	hxol4e1j=ch3hco+Cc4h7-1	2.00E+13	0.0	13030.0
3524.	hxol4e1j+m=c5h9hco-2+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3525.	hxol4e1j+o2=c5h9hco-2+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3526.	hxol4e1j+o=c5h9hco-2+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3527.	hxol4e1j+ho2=c5h9hco-2+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3528.	hxol4e1j+oh=c5h9hco-2+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3529.	hxol3e1j=ch3hco+Ac4h7-1	2.00E+13	0.0	41590.0
3530.	hxol3e1j+m=c5h9hco-3+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3531.	hxol3e1j+o2=c5h9hco-3+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3532.	hxol3e1j+o=c5h9hco-3+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3533.	hxol3e1j+ho2=c5h9hco-3+2oh	4.00E+13	0.0	0.0

3534.	hxol3e1j+oh=c5h9hco-3+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3535.	hxol4e6j=c4h6+pc2h4oh	2.00E+13	0.0	36400.0
3536.	hxol3e5j=c5h8-13+ch2oh	2.00E+13	0.0	29160.0
3537.	c6h10-13+oh=hxol2e4j	9.93E+11	0.0	-960.0
3538.	hxol2e4j=ch3+pe1ol2e4e	2.00E+13	0.0	39090.0
3539.	c5h9hco-3+oh=h2o+c5h9co-3	2.69E+10	0.8	-340.0
3540.	c5h9hco-3+h=h2+c5h9co-3	4.00E+13	0.0	4200.0
3541.	c5h9hco-3+o=oh+c5h9co-3	5.00E+12	0.0	1790.0
3542.	c5h9hco-3+ch3=ch4+c5h9co-3	1.70E+12	0.0	8440.0
3543.	c5h9hco-3+ho2=h2o2+c5h9co-3	2.80E+12	0.0	13600.0
3544.	c5h9hco-3+o2=ho2+c5h9co-3	2.00E+13	0.5	42200.0
3545.	c5h9hco-2+oh=h2o+c5h9co-2	2.69E+10	0.8	-340.0
3546.	c5h9hco-2+h=h2+c5h9co-2	4.00E+13	0.0	4200.0
3547.	c5h9hco-2+o=oh+c5h9co-2	5.00E+12	0.0	1790.0
3548.	c5h9hco-2+ch3=ch4+c5h9co-2	1.70E+12	0.0	8440.0
3549.	c5h9hco-2+ho2=h2o2+c5h9co-2	2.80E+12	0.0	13600.0
3550.	c5h9hco-2+o2=ho2+c5h9co-2	2.00E+13	0.5	42200.0
3551.	c5h9hco-1+o=oh+c5h9co-1	5.00E+12	0.0	1790.0
3552.	c5h9hco-1+ch3=ch4+c5h9co-1	1.70E+12	0.0	8440.0
3553.	c5h9hco-1+o2=ho2+c5h9co-1	2.00E+13	0.5	42200.0
3554.	c5h9co-2+M=co+Ec5h9-2+M	8.64E+15	0.0	14400.0
3555.	c5h9co-3+M=co+Cc5h9-1+M	8.64E+15	0.0	14400.0
3556.	Ec5h9-2=c2h4+sc3h5	4.00E+13	0.0	35060.0
3557.	Ec5h9-2+o2=c5h8-13+ho2	5.90E+05	0.0	0.0
3558.	Ec5h9-2=c5h8-13+h	1.20E+13	0.0	31600.0
3559.	pe1ol5j=pe1ol2j	5.70E+08	1.0	17300.0
3560.	pe1ol5j=pe1ol1j	9.90E+07	1.0	10000.0
3561.	pe1ol1j=pe1ol4j	5.70E+08	1.0	23300.0
3562.	pe1ol5j=ch2ch2ch2oh+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3563.	oh+c5h10=pe1ol2j	9.93E+11	0.0	-960.0
3564.	pe1ol4j=c3h6+pc2h4oh	2.00E+13	0.0	28700.0
3565.	pe1ol3j=ch2oh+c4h8	2.00E+13	0.0	28700.0
3566.	pe1ol3j=ch3+b1ol3e	2.00E+13	0.0	28700.0
3567.	pe1ol2j=c2h5+c2h3ch2oh	2.00E+13	0.0	28700.0
3568.	pe1ol1j=ch3hco+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700.0
3569.	pe1ol4e+oh=pe1ol3e5j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3570.	pe1ol4e+o=pe1ol3e5j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3571.	pe1ol4e+h=pe1ol3e5j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3572.	pe1ol4e+ch3=pe1ol3e5j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3573.	pe1ol4e+ho2=pe1ol3e5j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3574.	pe1ol4e+ch3o2=pe1ol3e5j+ch3o2h	2.20E+00	3.5	5675.0
3575.	pe1ol4e+oh=pe1jol4e+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3576.	pe1ol4e+o=pe1jol4e+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3577.	pe1ol4e+h=pe1jol4e+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3578.	pe1ol4e+ch3=pe1jol4e+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3579.	pe1ol4e+ho2=pe1jol4e+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3580.	pe1ol4e+ch3o2=pe1jol4e+ch3o2h	3.00E+12	0.0	17500.0
3581.	pe1ol4e+oh=ch2o+b1ol4j	1.00E+11	0.0	-4000.0
3582.	pe1ol4e+o=hco+b1ol4j	1.00E+11	0.0	-1050.0
3583.	pe1ol3e5j=c4h6+ch2oh	2.00E+13	0.0	34600.0
3584.	pe1jol4e=ch3hco+ac3h5	2.00E+13	0.0	13950.0
3585.	pe1jol4e+m=c4h7hco-1+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3586.	pe1jol4e+o2=c4h7hco-1+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3587.	pe1jol4e+o=c4h7hco-1+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3588.	pe1jol4e+ho2=c4h7hco-1+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3589.	pe1jol4e+oh=c4h7hco-1+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3590.	pe1ol2e4e+oh=pe1jol2e4e+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3591.	pe1ol2e4e+o=pe1jol2e4e+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3592.	pe1ol2e4e+h=pe1jol2e4e+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3593.	pe1ol2e4e+ch3=pe1jol2e4e+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3594.	pe1ol2e4e+ho2=pe1jol2e4e+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3595.	pe1ol2e4e+ch3o2=pe1jol2e4e+ch3o2h	2.20E+00	3.5	5675.0
3596.	pe1jol2e4e=c4h6+hco	2.00E+13	0.0	23150.0
3597.	pe1jol2e4e+m=c4h5hco+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3598.	pe1jol2e4e+o2=c4h5hco+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3599.	pe1jol2e4e+o=c4h5hco+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3600.	pe1jol2e4e+ho2=c4h5hco+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3601.	pe1jol2e4e+oh=c4h5hco+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3602.	c4h5hco+oh=h2o+c4h5co	2.69E+10	0.8	-340.0
3603.	c4h5hco+h=h2+c4h5co	4.00E+13	0.0	4200.0
3604.	c4h5hco+o=oh+c4h5co	5.00E+12	0.0	1790.0
3605.	c4h5hco+ch3=ch4+c4h5co	1.70E+12	0.0	8440.0
3606.	c4h5hco+ho2=h2o2+c4h5co	2.80E+12	0.0	13600.0
3607.	c4h5hco+o2=ho2+c4h5co	2.00E+13	0.5	42200.0
3608.	c4h5co+m=nc4h5+co+m	8.60E+15	0.0	23000.0
3609.	b1ol=h+b1ol1j	6.00E+15	0.0	95000.0
3610.	b1ol=h+b1ol2j	6.00E+15	0.0	98706.0
3611.	b1ol=h+b1ol3j	6.00E+15	0.0	98706.0
3612.	b1ol=h+b1ol4j	9.00E+15	0.0	100906.0
3613.	b1ol=h+c4h9o	6.30E+13	0.0	103234.0
3614.	b1ol=pc4h9+oh	4.90E+15	0.0	93374.0
3615.	b1ol=nc3h7+ch2oh	2.40E+16	0.0	85771.0
3616.	b1ol=ch3+ch2ch2ch2oh	7.10E+16	0.0	86221.0
3617.	b1ol=c2h5+pc2h4oh	5.00E+16	0.0	85771.0
3618.	b1ol+o2=ho2+b1ol1j	1.40E+10	0.0	45935.0
3619.	b1ol+o2=ho2+b1ol2j	1.40E+10	0.0	49097.5
3620.	b1ol+o2=ho2+b1ol3j	1.40E+10	0.0	49097.5
3621.	b1ol+o2=ho2+b1ol4j	2.10E+10	0.0	51296.5
3622.	b1ol+o=oh+c4h9o	1.46E-03	4.7	1726.9
3623.	b1ol+o=oh+b1ol1j	1.45E+05	2.5	876.4
3624.	b1ol+o=oh+b1ol2j	2.60E+13	0.0	5200.0
3625.	b1ol+o=oh+b1ol3j	2.60E+13	0.0	5200.0
3626.	b1ol+o=oh+b1ol4j	5.10E+13	0.0	7850.0
3627.	b1ol+h=h2+c4h9o	5.53E-23	10.6	-4459.0
3628.	b1ol+h=h2+b1ol1j	1.79E+05	2.5	3420.0
3629.	b1ol+h=h2+b1ol2j	9.00E+06	2.0	5000.0
3630.	b1ol+h=h2+b1ol3j	9.00E+06	2.0	5000.0
3631.	b1ol+h=h2+b1ol4j	2.90E+07	2.0	7700.0
3632.	b1ol+oh=h2o+c4h9o	2.81E+02	3.0	-580.3
3633.	b1ol+oh=h2o+b1ol1j	1.31E+05	2.4	-1456.6
3634.	b1ol+oh=h2o+b1ol2j	3.62E+07	1.6	-246.0
3635.	b1ol+oh=h2o+b1ol3j	3.62E+07	1.6	-246.0
3636.	b1ol+oh=h2o+b1ol4j	2.07E+07	1.7	753.0
3637.	b1ol+ho2=h2o2+c4h9o	2.50E+12	0.0	24000.0
3638.	b1ol+ho2=h2o2+b1ol1j	4.00E+11	0.0	16000.0
3639.	b1ol+ho2=h2o2+b1ol2j	4.00E+11	0.0	16000.0
3640.	b1ol+ho2=h2o2+b1ol3j	4.00E+11	0.0	16000.0
3641.	b1ol+ho2=h2o2+b1ol4j	1.23E+04	2.5	15750.0
3642.	b1ol+ch3=ch4+c4h9o	1.00E+11	0.0	7900.0
3643.	b1ol+ch3=ch4+b1ol1j	2.00E+11	0.0	9600.0
3644.	b1ol+ch3=ch4+b1ol2j	2.00E+11	0.0	9600.0
3645.	b1ol+ch3=ch4+b1ol3j	2.00E+11	0.0	9600.0
3646.	b1ol+ch3=ch4+b1ol4j	3.00E-01	4.0	8200.0
3647.	b1ol+hco=ch2o+c4h9o	3.40E+04	2.5	13500.0
3648.	b1ol+hco=ch2o+b1ol1j	1.00E+07	1.9	17000.0
3649.	b1ol+hco=ch2o+b1ol2j	1.00E+07	1.9	17000.0
3650.	b1ol+hco=ch2o+b1ol3j	1.00E+07	1.9	17000.0
3651.	b1ol+hco=ch2o+b1ol4j	1.00E+05	2.5	18500.0
3652.	b1ol+ch2oh=ch3oh+c4h9o	1.20E+02	2.8	10800.0
3653.	b1ol+ch2oh=ch3oh+b1ol1j	6.00E+01	3.0	12000.0
3654.	b1ol+ch2oh=ch3oh+b1ol2j	6.00E+01	3.0	12000.0
3655.	b1ol+ch2oh=ch3oh+b1ol3j	6.00E+01	3.0	12000.0
3656.	b1ol+ch2oh=ch3oh+b1ol4j	9.90E+01	3.0	14000.0
3657.	b1ol+ch3o=ch3oh+c4h9o	2.30E+10	0.0	2900.0
3658.	b1ol+ch3o=ch3oh+b1ol1j	1.50E+11	0.0	4500.0
3659.	b1ol+ch3o=ch3oh+b1ol2j	1.50E+11	0.0	4500.0
3660.	b1ol+ch3o=ch3oh+b1ol3j	1.50E+11	0.0	4500.0
3661.	b1ol+ch3o=ch3oh+b1ol4j	1.60E+11	0.0	7300.0
3662.	b1ol+c2h5=c2h6+c4h9o	1.00E+11	0.0	9200.0
3663.	b1ol+c2h5=c2h6+b1ol1j	2.00E+11	0.0	11000.0
3664.	b1ol+c2h5=c2h6+b1ol2j	2.00E+11	0.0	11000.0
3665.	b1ol+c2h5=c2h6+b1ol3j	2.00E+11	0.0	11000.0
3666.	b1ol+c2h5=c2h6+b1ol4j	3.00E+11	0.0	13500.0
3667.	b1ol+c2h3=c2h4+c4h9o	1.00E+11	0.0	7900.0
3668.	b1ol+c2h3=c2h4+b1ol1j	2.00E+11	0.0	9600.0
3669.	b1ol+c2h3=c2h4+b1ol2j	2.00E+11	0.0	9600.0
3670.	b1ol+c2h3=c2h4+b1ol3j	2.00E+11	0.0	9600.0
3671.	b1ol+c2h3=c2h4+b1ol4j	3.00E-01	4.0	8200.0
3672.	b1ol+ac3h5=c3h6+c4h9o	1.00E+11	0.0	9200.0
3673.	b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol1j	2.00E+11	0.0	11000.0
3674.	b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol2j	2.00E+11	0.0	11000.0
3675.	b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol3j	2.00E+11	0.0	11000.0
3676.	b1ol+ac3h5=c3h6+b1ol4j	3.00E+11	0.0	13500.0
3677.	b1ol+Cc4h7-1=c4h8+c4h9o	1.00E+11	0.0	9200.0
3678.	b1ol+Cc4h7-1=c4h8+b1ol1j	2.00E+11	0.0	11000.0
3679.	b1ol+Cc4h7-1=c4h8+b1ol2j	2.00E+11	0.0	11000.0
3680.	b1ol+Cc4h7-1=c4h8+b1ol3j	2.00E+11	0.0	11000.0
3681.	b1ol+Cc4h7-1=c4h8+b1ol4j	3.00E+11	0.0	13500.0
3682.	b1ol1j=b1ol3j	3.30E+09	1.0	43000.0
3683.	b1ol1j=b1ol4j	8.60E+08	1.0	26000.0
3684.	b1ol4j=b1ol2j	3.30E+09	1.0	37000.0
3685.	c4h9o=b1ol4j	3.86E+07	1.4	7670.0
3686.	b1ol3j=ch2oh+c3h6	2.00E+13	0.0	28700.0
3687.	b1ol1j=ch3hco+c2h5	2.00E+13	0.0	28700.0
3688.	b1ol4j=c2h4+pc2h4oh	2.00E+13	0.0	28700.0
3689.	b1ol2j=ch3+c2h3ch2oh	2.00E+13	0.0	31000.0
3690.	c4h8+oh=b1ol2j	1.29E+12	0.0	-817.0
3691.	c4h9o=ch2o+nc3h7	9.50E+13	0.0	16060.0
3692.	c4h9o=>h+nc3h7hco	3.00E+13	0.0	38000.0
3693.	b1ol4j=>h+c4h7oh	3.00E+13	0.0	38000.0
3694.	b1ol3j=>h+c4h7oh	6.00E+13	0.0	38000.0
3695.	b1ol1j+o2=c4h7oh+ho2	1.30E+12	0.0	6000.0
3696.	b1ol1j+o2=nc3h7hco+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3697.	c4h9o+o2=nc3h7hco+ho2	4.00E+10	0.0	1100.0
3698.	b1ol2j+o2=c4h7oh+ho2	1.30E+12	0.0	6000.0
3699.	b1ol3j+o2=c4h7oh+ho2	1.30E+12	0.0	6000.0
3700.	b1ol3j+o2=b1ol3e+ho2	6.50E+11	0.0	6000.0
3701.	b1ol4j+o2=b1ol3e+ho2	1.30E+12	0.0	6000.0
3702.	c4h7oh=>oh+Cc4h7-1	1.00E+16	0.0	63374.0
3703.	b1*o4ol+oh=h2o+b1j*o4ol	2.69E+10	0.8	-340.0
3704.	b1*o4ol+h=h2+b1j*o4ol	4.00E+13	0.0	4200.0
3705.	b1*o4ol+o=oh+b1j*o4ol	5.00E+12	0.0	1790.0
3706.	b1*o4ol+ch3=ch4+b1j*o4ol	1.70E+12	0.0	8440.0
3707.	b1*o4ol+ho2=h2o2+b1j*o4ol	2.80E+12	0.0	13600.0
3708.	b1*o4ol+o2=ho2+b1j*o4ol	2.00E+13	0.5	42200.0
3709.	b1ol3e+oh=b1ol2e4j+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
3710.	b1ol3e+o=b1ol2e4j+oh	4.00E+13	0.0	4000.0
3711.	b1ol3e+h=b1ol2e4j+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
3712.	b1ol3e+ch3=b1ol2e4j+ch4	2.00E+11	0.0	6800.0
3713.	b1ol3e+ho2=b1ol2e4j+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
3714.	b1ol3e+oh=b1jol3e+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3715.	b1ol3e+o=b1jol3e+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3716.	b1ol3e+h=b1jol3e+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3717.	b1ol3e+ch3=b1jol3e+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3718.	b1ol3e+ho2=b1jol3e+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3719.	b1j*o4ol+m=ch2ch2ch2oh+co+m	8.60E+15	0.0	23000.0
3720.	c4h6+oh=b1ol2e4j	9.93E+11	0.0	-960.0
3721.	b1ol2e4j+o2=ac3h5hco+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
3722.	b1jol3e+ho2=ac3h5hco+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3723.	b1jol3e+oh=ac3h5hco+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3724.	b1jol3e+o=ac3h5hco+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3725.	b1jol3e+o2=ac3h5hco+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3726.	b1jol3e+m=ac3h5hco+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3727.	ch2ch2ch2oh=ch2oh+c2h4	2.00E+13	0.0	28700.0
3728.	hoc2h4hco+oh=h2o+hoc2h4co	2.69E+10	0.8	-340.0
3729.	hoc2h4hco+h=h2+hoc2h4co	4.00E+13	0.0	4200.0
3730.	hoc2h4hco+o=oh+hoc2h4co	5.00E+12	0.0	1790.0
3731.	hoc2h4hco+ch3=ch4+hoc2h4co	1.70E+12	0.0	8440.0
3732.	hoc2h4hco+ho2=h2o2+hoc2h4co	2.80E+12	0.0	13600.0
3733.	hoc2h4hco+o2=ho2+hoc2h4co	2.00E+13	0.5	42200.0
3734.	hoc2h4co+M=co+pc2h4oh+M	8.64E+15	0.0	14400.0
3735.	c2h3ch2oh+oh=c2h3choh+h2o	1.31E+05	2.4	-1456.6
3736.	c2h3ch2oh+o=c2h3choh+oh	1.45E+05	2.5	876.4
3737.	c2h3ch2oh+h=c2h3choh+h2	1.79E+05	2.5	3420.0
3738.	c2h3ch2oh+ch3=c2h3choh+ch4	1.99E+01	3.4	7634.8
3739.	c2h3ch2oh+ho2=c2h3choh+h2o2	8.20E+03	2.5	10750.0
3740.	c2h3choh+ho2=acrol+2oh	4.00E+13	0.0	0.0
3741.	c2h3choh+oh=acrol+h2o	5.00E+12	0.0	0.0
3742.	c2h3choh+o=acrol+oh	1.00E+14	0.0	0.0
3743.	c2h3choh+o2=acrol+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0
3744.	c2h3choh+m=acrol+h+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3745.	hoch2hco+oh=h2o+hoch2co	2.69E+10	0.8	-340.0
3746.	hoch2hco+h=h2+hoch2co	4.00E+13	0.0	4200.0
3747.	hoch2hco+o=oh+hoch2co	5.00E+12	0.0	1790.0
3748.	hoch2hco+ch3=ch4+hoch2co	1.70E+12	0.0	8440.0
3749.	hoch2hco+ho2=h2o2+hoch2co	2.80E+12	0.0	13600.0
3750.	hoch2hco+o2=ho2+hoch2co	2.00E+13	0.5	42200.0
3751.	hoch2co+M=co+ch2oh+M	8.64E+15	0.0	14400.0
3752.	c2h3ch2oh=>ac3h5+oh	1.00E+16	0.0	63374.0
3753.	hxol1o2+ho2=hxol1o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3754.	hxol2o2+ho2=hxol2o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3755.	hxol3o2+ho2=hxol3o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3756.	hxol4o2+ho2=hxol4o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3757.	hxol5o2+ho2=hxol5o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3758.	hxol6o2+ho2=hxol6o2h+o2	1.75E+10	0.0	-3275.0
3759.	hxol1o2+h2o2=hxol1o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3760.	hxol2o2+h2o2=hxol2o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3761.	hxol3o2+h2o2=hxol3o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3762.	hxol4o2+h2o2=hxol4o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3763.	hxol5o2+h2o2=hxol5o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3764.	hxol6o2+h2o2=hxol6o2h+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
3765.	hxol1o2+hxol1o2=>hxol1o+hxol1o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3766.	hxol1o2+hxol2o2=>hxol1o+hxol2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3767.	hxol1o2+hxol3o2=>hxol1o+hxol3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3768.	hxol1o2+hxol4o2=>hxol1o+hxol4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3769.	hxol1o2+hxol5o2=>hxol1o+hxol5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3770.	hxol1o2+hxol6o2=>hxol1o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3771.	hxol2o2+hxol2o2=>hxol2o+hxol2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3772.	hxol2o2+hxol3o2=>hxol2o+hxol3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3773.	hxol2o2+hxol4o2=>hxol2o+hxol4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3774.	hxol2o2+hxol5o2=>hxol2o+hxol5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3775.	hxol2o2+hxol6o2=>hxol2o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3776.	hxol3o2+hxol3o2=>hxol3o+hxol3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3777.	hxol3o2+hxol4o2=>hxol3o+hxol4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0

3778.	hxol3o2+hxol5o2=>hxol3o+hxol5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3779.	hxol3o2+hxol6o2=>hxol3o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3780.	hxol4o2+hxol4o2=>hxol4o+hxol4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3781.	hxol4o2+hxol5o2=>hxol4o+hxol5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3782.	hxol4o2+hxol6o2=>hxol4o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3783.	hxol5o2+hxol5o2=>hxol5o+hxol5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3784.	hxol5o2+hxol6o2=>hxol5o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3785.	hxol6o2+hxol6o2=>hxol6o+hxol6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3786.	hxol1o2+ch3o2=hxol1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3787.	hxol2o2+ch3o2=hxol2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3788.	hxol3o2+ch3o2=hxol3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3789.	hxol4o2+ch3o2=hxol4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3790.	hxol5o2+ch3o2=hxol5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3791.	hxol6o2+ch3o2=hxol6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3792.	hxol1o2+ho2=hxol1o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3793.	hxol2o2+ho2=hxol2o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3794.	hxol3o2+ho2=hxol3o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3795.	hxol4o2+ho2=hxol4o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3796.	hxol5o2+ho2=hxol5o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3797.	hxol6o2+ho2=hxol6o+oh+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
3798.	hxol6o2h=oh+hxol6o	1.50E+16	0.0	42500.0
3799.	hxol5o2h=oh+hxol5o	9.45E+15	0.0	41600.0
3800.	hxol4o2h=oh+hxol4o	9.45E+15	0.0	41600.0
3801.	hxol3o2h=oh+hxol3o	9.45E+15	0.0	41600.0
3802.	hxol2o2h=oh+hxol2o	9.45E+15	0.0	41600.0
3803.	hxol1o2h=oh+hxol1o	5.95E+15	0.0	42540.0
3804.	hxol2o2=nc4h9hco+ch2o+oh	1.25E+10	0.0	18900.0
3805.	hxol1o2=hxol2j1o2h	1.30E+08	1.4	31999.0
3806.	hxol1o2=hxol3j1o2h	2.23E+07	1.4	24499.0
3807.	hxol1o2=hxol4j1o2h	3.84E+06	1.4	21499.0
3808.	hxol2o2=hxol1j2o2h	2.14E+08	1.4	30629.0
3809.	hxol2o2=hxol3j2o2h	2.11E+08	1.4	32072.0
3810.	hxol2o2=hxol4j2o2h	2.17E+07	1.4	24491.0
3811.	hxol2o2=hxol5j2o2h	6.44E+06	1.4	21574.0
3812.	hxol3o2=hxol1j3o2h	3.76E+07	1.4	23133.0
3813.	hxol3o2=hxol2j3o2h	2.16E+08	1.4	32076.0
3814.	hxol3o2=hxol4j3o2h	2.16E+08	1.4	32076.0
3815.	hxol3o2=hxol5j3o2h	2.23E+07	1.4	24495.0
3816.	hxol3o2=hxol6j3o2h	5.29E+06	1.4	22250.0
3817.	hxol4o2=hxol1j4o2h	5.68E+06	1.4	20113.0
3818.	hxol4o2=hxol2j4o2h	1.94E+07	1.4	24474.0
3819.	hxol4o2=hxol3j4o2h	1.13E+08	1.4	31974.0
3820.	hxol4o2=hxol5j4o2h	1.14E+08	1.4	31972.0
3821.	hxol4o2=hxol6j4o2h	4.62E+07	1.4	25314.0
3822.	hxol5o2=hxol2j5o2h	5.23E+06	1.4	21619.0
3823.	hxol5o2=hxol3j5o2h	3.04E+07	1.4	24619.0
3824.	hxol5o2=hxol4j5o2h	1.77E+08	1.4	32119.0
3825.	hxol5o2=hxol6j5o2h	3.91E+08	1.3	32631.0
3826.	hxol6o2=hxol3j6o2h	4.09E+06	1.4	21514.5
3827.	hxol6o2=hxol4j6o2h	2.38E+07	1.4	24514.5
3828.	hxol6o2=hxol5j6o2h	1.38E+08	1.4	32014.5
3829.	hxol2j1o2h=oh+hxolcy2o1	2.95E+11	0.0	22000.0
3830.	hxol3j1o2h=oh+hxolcy3o1	2.50E+10	0.0	15250.0
3831.	hxol4j1o2h=oh+hxolcy4o1	2.10E+08	0.0	6500.0
3832.	hxol1j2o2h=oh+hxolcy2o1	2.95E+11	0.0	22000.0
3833.	hxol3j2o2h=oh+hxolcy3o2	2.95E+11	0.0	22000.0
3834.	hxol4j2o2h=oh+hxolcy4o2	2.50E+10	0.0	15250.0
3835.	hxol5j2o2h=oh+hxolcy5o2	2.10E+08	0.0	6500.0
3836.	hxol1j3o2h=oh+hxolcy3o1	2.50E+10	0.0	15250.0
3837.	hxol2j3o2h=oh+hxolcy3o2	2.95E+11	0.0	22000.0
3838.	hxol4j3o2h=oh+hxolcy4o3	2.95E+11	0.0	22000.0
3839.	hxol5j3o2h=oh+hxolcy5o3	2.50E+10	0.0	15250.0
3840.	hxol6j3o2h=oh+hxolcy6o3	2.10E+08	0.0	6500.0
3841.	hxol1j4o2h=oh+hxolcy4o1	2.10E+08	0.0	6500.0
3842.	hxol2j4o2h=oh+hxolcy4o2	2.10E+08	0.0	6500.0
3843.	hxol3j4o2h=oh+hxolcy4o3	2.95E+11	0.0	22000.0
3844.	hxol5j4o2h=oh+hxolcy5o4	2.95E+11	0.0	22000.0
3845.	hxol6j4o2h=oh+hxolcy6o4	2.50E+10	0.0	15250.0
3846.	hxol2j5o2h=oh+hxolcy5o2	2.10E+08	0.0	6500.0
3847.	hxol3j5o2h=oh+hxolcy5o3	2.50E+10	0.0	15250.0
3848.	hxol4j5o2h=oh+hxolcy5o4	2.95E+11	0.0	22000.0
3849.	hxol6j5o2h=oh+hxolcy6o5	2.95E+11	0.0	22000.0
3850.	hxol3j6o2h=oh+hxolcy6o3	2.10E+08	0.0	6500.0
3851.	hxol4j6o2h=oh+hxolcy6o4	2.50E+10	0.0	15250.0
3852.	hxol5j6o2h=oh+hxolcy6o5	2.95E+11	0.0	22000.0
3853.	hxol2j1o2h=ho2+c5h11hco	8.50E+12	0.0	26000.0
3854.	hxol1j2o2h=ho2+c5h11hco	8.50E+12	0.0	26000.0
3855.	hxol3j2o2h=ho2+hxol2e	8.50E+12	0.0	26000.0
3856.	hxol2j3o2h=ho2+hxol2e	8.50E+12	0.0	26000.0
3857.	hxol4j3o2h=ho2+hxol3e	8.50E+12	0.0	26000.0
3858.	hxol3j4o2h=ho2+hxol3e	8.50E+12	0.0	26000.0
3859.	hxol5j4o2h=ho2+hxol4e	8.50E+12	0.0	26000.0
3860.	hxol4j5o2h=ho2+hxol4e	8.50E+12	0.0	26000.0
3861.	hxol6j5o2h=ho2+hxol5e	8.50E+12	0.0	26000.0
3862.	hxol5j6o2h=ho2+hxol5e	8.50E+12	0.0	26000.0
3863.	hxol3j1o2h=oh+c5h10+hocho	5.00E+13	0.0	25500.0
3864.	hxol4j2o2h=oh+c4h8+hoch2hco	5.00E+13	0.0	25500.0
3865.	hxol1j3o2h=oh+ch3hco+nc3h7hco	5.00E+13	0.0	25500.0
3866.	hxol5j3o2h=oh+c3h6+hoc2h4hco	5.00E+13	0.0	25500.0
3867.	hxol6j4o2h=oh+c2h4+b1*o4ol	5.00E+13	0.0	25500.0
3868.	hxol3j5o2h=oh+ch3hco+b1ol3e	5.00E+13	0.0	25500.0
3869.	hxol4j6o2h=oh+ch2o+pe1ol4e	5.00E+13	0.0	25500.0
3870.	hxol1j4o2h=ch3hco+c4h8rAqB	2.00E+13	0.0	28700.0
3871.	hxol2j1o2h+o2=hxol1o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3872.	hxol3j1o2h+o2=hxol1o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3873.	hxol4j1o2h+o2=hxol1o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3874.	hxol1j2o2h+o2=hxol2o2h1o2	2.43E+39	-9.0	8620.0
3875.	hxol3j2o2h+o2=hxol2o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3876.	hxol4j2o2h+o2=hxol2o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3877.	hxol5j2o2h+o2=hxol2o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3878.	hxol1j3o2h+o2=hxol3o2h1o2	2.43E+39	-9.0	8620.0
3879.	hxol2j3o2h+o2=hxol3o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3880.	hxol4j3o2h+o2=hxol3o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3881.	hxol5j3o2h+o2=hxol3o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3882.	hxol6j3o2h+o2=hxol3o2h6o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3883.	hxol1j4o2h+o2=hxol4o2h1o2	2.43E+39	-9.0	8620.0
3884.	hxol2j4o2h+o2=hxol4o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3885.	hxol3j4o2h+o2=hxol4o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3886.	hxol5j4o2h+o2=hxol4o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3887.	hxol6j4o2h+o2=hxol4o2h6o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3888.	hxol2j5o2h+o2=hxol5o2h2o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3889.	hxol3j5o2h+o2=hxol5o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3890.	hxol4j5o2h+o2=hxol5o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3891.	hxol6j5o2h+o2=hxol5o2h6o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3892.	hxol3j6o2h+o2=hxol6o2h3o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3893.	hxol4j6o2h+o2=hxol6o2h4o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3894.	hxol5j6o2h+o2=hxol6o2h5o2	1.84E+45	-11.1	6538.0
3895.	hxol1j2o2h+o2=ho2+c6h11oAqB	1.00E+13	0.0	5564.0
3896.	hxol1j3o2h+o2=ho2+c6h11oAqC	1.00E+13	0.0	5564.0
3897.	hxol1j4o2h+o2=ho2+c6h11oAqD	1.00E+13	0.0	5564.0
3898.	hxol1j2o2h+m=h+c6h11oAqB+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3899.	hxol1j3o2h+m=h+c6h11oAqC+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3900.	hxol1j4o2h+m=h+c6h11oAqD+m	1.00E+14	0.0	25000.0
3901.	hxol1o2h2o2=oh+hxol1*o2o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3902.	hxol1o2h3o2=oh+hxol1*o3o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3903.	hxol1o2h4o2=oh+hxol1*o4o2h	4.94E+07	1.0	20000.0
3904.	hxol2o2h1o2=oh+hxol2*o1o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3905.	hxol2o2h3o2=oh+hxol2*o3o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3906.	hxol2o2h4o2=oh+hxol2*o4o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3907.	hxol2o2h5o2=oh+hxol2*o5o2h	4.94E+07	1.0	20000.0
3908.	hxol3o2h1o2=oh+hxol3*o1o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3909.	hxol3o2h2o2=oh+hxol3*o2o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3910.	hxol3o2h4o2=oh+hxol3*o4o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3911.	hxol3o2h5o2=oh+hxol3*o5o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3912.	hxol3o2h6o2=oh+hxol3*o6o2h	4.94E+07	1.0	20000.0
3913.	hxol4o2h1o2=oh+hxol4*o1o2h	4.94E+07	1.0	20000.0
3914.	hxol4o2h2o2=oh+hxol4*o2o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3915.	hxol4o2h3o2=oh+hxol4*o3o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3916.	hxol4o2h5o2=oh+hxol4*o5o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3917.	hxol4o2h6o2=oh+hxol4*o6o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3918.	hxol5o2h2o2=oh+hxol5*o2o2h	4.94E+07	1.0	20000.0
3919.	hxol5o2h3o2=oh+hxol5*o3o2h	2.88E+08	1.0	23000.0
3920.	hxol5o2h4o2=oh+hxol5*o4o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3921.	hxol5o2h6o2=oh+hxol5*o6o2h	1.67E+09	1.0	30500.0
3922.	hxol6o2h3o2=oh+hxol6*o3o2h	9.89E+07	1.0	20000.0
3923.	hxol6o2h4o2=oh+hxol6*o4o2h	5.75E+08	1.0	26000.0
3924.	hxol6o2h5o2=oh+hxol6*o5o2h	3.35E+09	1.0	33500.0
3925.	hxol1*o2o2h=oh+nc4h9hco+hoco	7.50E+15	0.0	44500.0
3926.	hxol1*o3o2h=oh+nc3h7hco+ch2cooh	7.50E+15	0.0	44500.0
3927.	hxol1*o4o2h=oh+ethco+ch2ch2cooh	7.50E+15	0.0	44500.0
3928.	hxol2*o1o2h=oh+hocho+nc4h9co	7.50E+15	0.0	44500.0
3929.	hxol2*o3o2h=oh+nc3h7hco+hoch2co	7.50E+15	0.0	44500.0
3930.	hxol2*o4o2h=oh+ethco+hoch2coch2	7.50E+15	0.0	44500.0
3931.	hxol2*o5o2h=oh+ch3hco+b1ol2*o4j	7.50E+15	0.0	44500.0
3932.	hxol3*o1o2h=oh+hocho+nc3h7coch2	7.50E+15	0.0	44500.0
3933.	hxol3*o2o2h=oh+hoch2hco+c3h7co	7.50E+15	0.0	44500.0
3934.	hxol3*o4o2h=oh+ethco+hoc2h4co	7.50E+15	0.0	44500.0
3935.	hxol3*o5o2h=oh+ch3hco+b1ol3*o4j	7.50E+15	0.0	44500.0
3936.	hxol3*o6o2h=oh+ch2o+pe1ol3*o5j	7.50E+15	0.0	44500.0
3937.	hxol4*o1o2h=oh+hocho+c2h5coc2h4p	7.50E+15	0.0	44500.0
3938.	hxol4*o2o2h=oh+c2h5coch2+hoch2hco	7.50E+15	0.0	44500.0
3939.	hxol4*o3o2h=oh+c2h5co+hoc2h4hco	7.50E+15	0.0	44500.0
3940.	hxol4*o5o2h=oh+ch3hco+b1j*o4ol	7.50E+15	0.0	44500.0
3941.	hxol4*o6o2h=oh+ch2o+pe1ol4*o5j	7.50E+15	0.0	44500.0
3942.	hxol5*o2o2h=oh+ch3coc2h4p+hoch2hco	7.50E+15	0.0	44500.0
3943.	hxol5*o3o2h=oh+hoc2h4hco+ch2coch3	7.50E+15	0.0	44500.0
3944.	hxol5*o4o2h=oh+ch3co+b1*o4ol	7.50E+15	0.0	44500.0
3945.	hxol5*o6o2h=oh+ch2o+pe1j*o5ol	7.50E+15	0.0	44500.0
3946.	hxol6*o3o2h=oh+ch2ch2hco+hoc2h4hco	7.50E+15	0.0	44500.0
3947.	hxol6*o4o2h=oh+ch2hco+b1*o4ol	7.50E+15	0.0	44500.0
3948.	hxol6*o5o2h=oh+hco+pe1*o5ol	7.50E+15	0.0	44500.0
3949.	hxolcy2o1+oh=hxol2*o1j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3950.	hxolcy2o1+oh=c5h10cooh-1+h2o	1.40E+05	2.4	-1257.0
3951.	hxolcy3o1+oh=hxol3*o1j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3952.	hxolcy3o1+oh=c5h10cooh-2+h2o	1.40E+05	2.4	-1257.0
3953.	hxolcy4o1+oh=hxol4*o1j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3954.	hxolcy4o1+oh=c5h10cooh-3+h2o	1.40E+05	2.4	-1257.0
3955.	hxolcy3o2+oh=hxol2*o3j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3956.	hxolcy3o2+oh=hxol3*o2j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3957.	hxolcy4o2+oh=hxol4*o2j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3958.	hxolcy4o2+oh=hxol2*o4j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3959.	hxolcy5o2+oh=hxol5*o2j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3960.	hxolcy5o2+oh=hxol2*o5j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3961.	hxolcy4o3+oh=hxol4*o3j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3962.	hxolcy4o3+oh=hxol3*o4j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3963.	hxolcy5o3+oh=hxol5*o3j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3964.	hxolcy5o3+oh=hxol3*o5j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3965.	hxolcy6o3+oh=hxol3*o6j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3966.	hxolcy6o3+oh=hxol6*o3j+h2o	2.40E+08	2.0	-1192.0
3967.	hxolcy5o4+oh=hxol5*o4j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3968.	hxolcy5o4+oh=hxol4*o5j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3969.	hxolcy6o4+oh=hxol6*o4j+h2o	2.40E+08	2.0	-1192.0
3970.	hxolcy6o4+oh=hxol4*o6j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3971.	hxolcy6o5+oh=hxol5*o6j+h2o	1.20E+06	2.0	-1192.0
3972.	hxolcy6o5+oh=hxol6*o5j+h2o	2.40E+08	2.0	-1192.0
3973.	hxolcy2o1+h=hxol2*o1j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3974.	hxolcy2o1+h=c5h10cooh-1+h2	8.80E+04	2.5	-564.0
3975.	hxolcy3o1+h=hxol3*o1j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3976.	hxolcy3o1+h=c5h10cooh-2+h2	8.80E+04	2.5	-564.0
3977.	hxolcy4o1+h=hxol4*o1j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3978.	hxolcy4o1+h=c5h10cooh-3+h2	8.80E+04	2.5	-564.0
3979.	hxolcy3o2+h=hxol2*o3j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3980.	hxolcy3o2+h=hxol3*o2j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3981.	hxolcy4o2+h=hxol4*o2j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3982.	hxolcy4o2+h=hxol2*o4j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3983.	hxolcy5o2+h=hxol5*o2j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3984.	hxolcy5o2+h=hxol2*o5j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3985.	hxolcy4o3+h=hxol4*o3j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3986.	hxolcy4o3+h=hxol3*o4j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3987.	hxolcy5o3+h=hxol5*o3j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3988.	hxolcy5o3+h=hxol3*o5j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3989.	hxolcy6o3+h=hxol3*o6j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3990.	hxolcy6o3+h=hxol6*o3j+h2	4.80E+08	1.5	2785.0
3991.	hxolcy5o4+h=hxol5*o4j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3992.	hxolcy5o4+h=hxol4*o5j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3993.	hxolcy6o4+h=hxol6*o4j+h2	4.80E+08	1.5	2785.0
3994.	hxolcy6o4+h=hxol4*o6j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3995.	hxolcy6o5+h=hxol5*o6j+h2	2.40E+08	1.5	2005.0
3996.	hxolcy6o5+h=hxol6*o5j+h2	4.80E+08	1.5	2785.0
3997.	hxolcy2o1+ho2=hxol2*o1j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
3998.	hxolcy2o1+ho2=c5h10cooh-1+h2o2	1.25E+13	0.0	21760.0
3999.	hxolcy3o1+ho2=hxol3*o1j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4000.	hxolcy3o1+ho2=c5h10cooh-2+h2o2	1.25E+13	0.0	21760.0
4001.	hxolcy4o1+ho2=hxol4*o1j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4002.	hxolcy4o1+ho2=c5h10cooh-3+h2o2	1.25E+13	0.0	21760.0
4003.	hxolcy3o2+ho2=hxol2*o3j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4004.	hxolcy3o2+ho2=hxol3*o2j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4005.	hxolcy4o2+ho2=hxol4*o2j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4006.	hxolcy4o2+ho2=hxol2*o4j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4007.	hxolcy5o2+ho2=hxol5*o2j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4008.	hxolcy5o2+ho2=hxol2*o5j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4009.	hxolcy4o3+ho2=hxol4*o3j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4010.	hxolcy4o3+ho2=hxol3*o4j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4011.	hxolcy5o3+ho2=hxol5*o3j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4012.	hxolcy5o3+ho2=hxol3*o5j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4013.	hxolcy6o3+ho2=hxol3*o6j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4014.	hxolcy6o3+ho2=hxol6*o3j+h2o2	4.00E+12	0.0	14400.0
4015.	hxolcy5o4+ho2=hxol5*o4j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4016.	hxolcy5o4+ho2=hxol4*o5j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4017.	hxolcy6o4+ho2=hxol6*o4j+h2o2	4.00E+12	0.0	14400.0
4018.	hxolcy6o4+ho2=hxol4*o6j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4019.	hxolcy6o5+ho2=hxol5*o6j+h2o2	2.00E+12	0.0	13260.0
4020.	hxolcy6o5+ho2=hxol6*o5j+h2o2	4.00E+12	0.0	14400.0
4021.	hxol2*o1j+o2=c4h9cohco+ho2	1.00E+13	0.0	5564.0

4022. hxol2*o1j+ho2=c4h9cohco+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
4023. hxol2*o1j+oh=c4h9cohco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
4024. hxol2*o1j+o=c4h9cohco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
4025. ch3hco+c3h7co=hxol3*o1j 1.28E+02 2.9 6728.0
4026. hxol3*o1j+o2=c3h7coch2hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
4027. hxol3*o1j+ho2=c3h7coch2hco+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
4028. hxol3*o1j+oh=c3h7coch2hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
4029. hxol3*o1j+o=c3h7coch2hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
4030. c2h5coch2+ch3hco=hxol4*o1j 8.80E+03 2.5 6130.0
4031. hxol4*o1j+o2=c2h5coc2h4hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
4032. hxol4*o1j+ho2=c2h5coc2h4hco+2oh 4.00E+13 0.0 0.0
4033. hxol4*o1j+oh=c2h5coc2h4hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
4034. hxol4*o1j+o=c2h5coc2h4hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
4035. nc3h7+c2h3cooh=c5h10cooh-1 8.80E+03 2.5 6130.0
4036. c5h10+hoco=c5h10cooh-2 1.28E+02 2.9 6728.0
4037. c4h8+ch2cooh=c5h10cooh-3 1.07E+02 2.9 9290.0
4038. c2h5+c2h3coch2oh=hxol2*o3j 8.80E+03 2.5 6130.0
4039. c3h7coc2h3+oh=hxol3*o2j 9.93E+11 0.0 -960.0
4040. oh+c2h5coc3h5-1=hxol4*o2j 9.93E+11 0.0 -960.0
4041. c2h5co+c2h3ch2oh=hxol4*o2j 1.28E+02 2.9 6728.0
4042. c4h8+hoch2co=hxol2*o4j 1.28E+02 2.9 6728.0
4043. oh+ch3coc4h7-1=hxol5*o2j 9.93E+11 0.0 -960.0
4044. c2h3ch2oh+ch2coch3=hxol5*o2j 1.07E+02 2.9 9290.0
4045. c3h6+hoch2coch2=hxol2*o5j 1.07E+02 2.9 9290.0
4046. ch2oh+c2h5coc2h3=hxol4*o3j 2.41E+10 0.0 6955.0
4047. ch3+pe1ol3*o4e=hxol3*o4j 1.76E+04 2.5 6130.0
4048. ch3co+b1ol3e=hxol5*o3j 1.28E+02 2.9 6728.0
4049. c3h6+hoc2h4co=hxol3*o5j 1.28E+02 2.9 6728.0
4050. c2h4+b1ol3*o4j=hxol3*o6j 1.07E+02 2.9 9290.0
4051. ch2oh+c4h7hco-1=hxol6*o3j 8.80E+03 2.5 6130.0
4052. ch2hco+b1ol3e=hxol6*o3j 1.07E+02 2.9 9290.0
4053. pc2h4oh+mvk=hxol5*o4j 8.80E+03 2.5 6130.0
4054. ch3chco+ch2ch2ch2oh=hxol4*o5j 3.30E+02 2.7 13952.0
4055. hco+pe1ol4e=hxol6*o4j 1.28E+02 2.9 6728.0
4056. c2h4+b1j*o4ol=hxol4*o6j 1.28E+02 2.9 6728.0
4057. ch2co+b1ol4j=hxol5*o6j 3.30E+02 2.7 13952.0
4058. acrol+ch2ch2ch2oh=hxol6*o5j 8.80E+03 2.5 6130.0
4059. ch2co+ch2oh=hoch2coch2 3.30E+02 2.7 13952.0
4060. c2h4+hoch2co=b1ol2*o4j 1.28E+02 2.9 6728.0
4061. ch2co+pc2h4oh=b1ol3*o4j 3.30E+02 2.7 13952.0
4062. c2h4+hoc2h4co=pe1ol3*o5j 1.28E+02 2.9 6728.0
4063. ch2ch2ch2oh+ch2co=pe1ol4*o5j 3.30E+02 2.7 13952.0
4064. pe1*o5ol+oh=h2o+pe1j*o5ol 2.69E+10 0.8 -340.0
4065. pe1*o5ol+h=h2+pe1j*o5ol 4.00E+13 0.0 4200.0
4066. pe1*o5ol+o=oh+pe1j*o5ol 5.00E+12 0.0 1790.0
4067. pe1*o5ol+ch3=ch4+pe1j*o5ol 1.70E+12 0.0 8440.0
4068. pe1*o5ol+ho2=h2o2+pe1j*o5ol 2.80E+12 0.0 13600.0
4069. pe1*o5ol+o2=ho2+pe1j*o5ol 2.00E+13 0.5 42200.0
4070. pe1j*o5ol+M=co+b1ol4j+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4071. c3h7coc2h3+oh=c3h6coc2h3-1+h2o 2.06E+07 1.7 753.0
4072. c3h7coc2h3+ho2=c3h6coc2h3-1+h2o2 2.38E+04 2.5 16490.0
4073. c3h7coc2h3+o=c3h6coc2h3-1+oh 2.25E+13 0.0 7700.0
4074. c3h7coc2h3+h=c3h6coc2h3-1+h2 9.16E+06 2.0 7700.0
4075. c3h7coc2h3+o2=c3h6coc2h3-1+ho2 2.05E+13 0.0 51310.0
4076. c3h7coc2h3+ch3=c3h6coc2h3-1+ch4 3.19E+01 3.2 7172.0
4077. c3h7coc2h3+oh=c3h6coc2h3-2+h2o 3.62E+07 1.6 -247.0
4078. c3h7coc2h3+ho2=c3h6coc2h3-2+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
4079. c3h7coc2h3+oh=c3h6coc2h3-3+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
4080. c3h7coc2h3+ho2=c3h6coc2h3-3+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
4081. c3h7coc2h3+o=c3h6coc2h3-3+oh 3.07E+13 0.0 3400.0
4082. c3h7coc2h3+h=c3h6coc2h3-3+h2 4.46E+06 2.0 3200.0

4083. c3h7coc2h3+o2=c3h6coc2h3-3+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
4084. c3h7coc2h3+ch3=c3h6coc2h3-3+ch4 1.74E+00 3.5 3680.0
4085. c2h4+ch2coc2h3=c3h6coc2h3-1 1.00E+11 0.0 8600.0
4086. c3h6+c2h3co=c3h6coc2h3-2 1.00E+11 0.0 7800.0
4087. divinket+ch3=c3h6coc2h3-3 1.00E+11 0.0 7800.0
4088. c2h5coc3h5-1+ho2=h2o2+c2h5coc3h4 1.00E+11 0.0 17060.0
4089. c2h5coc3h5-1+o=oh+c2h5coc3h4 4.00E+13 0.0 4000.0
4090. c2h5coc3h5-1+h=h2+c2h5coc3h4 6.55E+12 0.0 4445.0
4091. c2h5coc3h5-1+oh=h2o+c2h5coc3h4 4.19E+06 2.0 -543.0
4092. c2h5coc3h5-1+ch3=ch4+c2h5coc3h4 2.00E+11 0.0 6800.0
4093. c2h5coc3h5-1+c2h3=c2h4+c2h5coc3h4 2.00E+11 0.0 6800.0
4094. c2h5coc3h5-1+nc3h7=c3h8+c2h5coc3h4 2.00E+11 0.0 8300.0
4095. c2h5coc3h4+o=acrol+c2h5co 2.00E+14 0.0 0.0
4096. pe1ol3*o4e+oh=pe1ol3*o4e2j+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
4097. pe1ol3*o4e+ho2=pe1ol3*o4e2j+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
4098. pe1ol3*o4e+o=pe1ol3*o4e2j+oh 3.07E+13 0.0 3400.0
4099. pe1ol3*o4e+h=pe1ol3*o4e2j+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
4100. pe1ol3*o4e+o2=pe1ol3*o4e2j+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
4101. pe1ol3*o4e+ch3=pe1ol3*o4e2j+ch4 1.74E+00 3.5 3680.0
4102. pe1ol3*o4e+oh=pe1jol3*o4e+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
4103. pe1ol3*o4e+o=pe1jol3*o4e+oh 1.45E+05 2.5 876.4
4104. pe1ol3*o4e+h=pe1jol3*o4e+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
4105. pe1ol3*o4e+ch3=pe1jol3*o4e+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
4106. pe1ol3*o4e+ho2=pe1jol3*o4e+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
4107. pe1ol3*o4e+ch3o2=pe1jol3*o4e+ch3o2h 3.00E+12 0.0 17500.0
4108. oh+divinket=pe1ol3*o4e2j 9.93E+11 0.0 -960.0
4109. ch3hco+c2h3co=pe1jol3*o4e 1.28E+02 2.9 6728.0
4110. pe1jol3*o4e+ho2=c2h3coch2hco+h2o2 4.00E+13 0.0 0.0
4111. pe1jol3*o4e+oh=c2h3coch2hco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
4112. pe1jol3*o4e+o=c2h3coch2hco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
4113. pe1jol3*o4e+o2=c2h3coch2hco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
4114. pe1jol3*o4e+m=c2h3coch2hco+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
4115. c2h3coch2hco+oh=h2o+c2h3coch2co 2.69E+10 0.8 -340.0
4116. c2h3coch2hco+h=h2+c2h3coch2co 4.00E+13 0.0 4200.0
4117. c2h3coch2hco+o=oh+c2h3coch2co 5.00E+12 0.0 1790.0
4118. c2h3coch2hco+ch3=ch4+c2h3coch2co 1.70E+12 0.0 8440.0
4119. c2h3coch2hco+ho2=h2o2+c2h3coch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
4120. c2h3coch2hco+o2=ho2+c2h3coch2co 2.00E+13 0.5 42200.0
4121. c2h3coch2co+M=co+ch2coc2h3+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4122. ch3coc4h7-1+oh=Cc6e5oB+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
4123. ch3coc4h7-1+ho2=Cc6e5oB+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
4124. ch3coc4h7-1+o=Cc6e5oB+oh 3.07E+13 0.0 3400.0
4125. ch3coc4h7-1+h=Cc6e5oB+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
4126. ch3coc4h7-1+o2=Cc6e5oB+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
4127. ch3coc4h7-1+ch3=Cc6e5oB+ch4 1.74E+00 3.5 3680.0
4128. ch3coc4h7-1+ho2=h2o2+Dc6e5oB 1.00E+11 0.0 17060.0
4129. ch3coc4h7-1+o=oh+Dc6e5oB 4.00E+13 0.0 4000.0
4130. ch3coc4h7-1+h=h2+Dc6e5oB 6.55E+12 0.0 4445.0
4131. ch3coc4h7-1+oh=h2o+Dc6e5oB 4.19E+06 2.0 -543.0
4132. ch3coc4h7-1+ch3=ch4+Dc6e5oB 2.00E+11 0.0 6800.0
4133. ch3coc4h7-1+c2h3=c2h4+Dc6e5oB 2.00E+11 0.0 6800.0
4134. ch3coc4h7-1+nc3h7=c3h8+Dc6e5oB 2.00E+11 0.0 8300.0
4135. c2h3+mvk=Cc6e5oB 2.00E+11 0.0 2010.0
4136. c4h6+ch3co=Dc6e5oB 1.28E+02 2.9 6728.0
4137. c2h3coch2oh+oh=c2h3cochoh+h2o 1.31E+05 2.4 -1456.6
4138. c2h3coch2oh+o=c2h3cochoh+oh 1.45E+05 2.5 876.4
4139. c2h3coch2oh+h=c2h3cochoh+h2 1.79E+05 2.5 3420.0
4140. c2h3coch2oh+ch3=c2h3cochoh+ch4 1.99E+01 3.4 7634.8
4141. c2h3coch2oh+ho2=c2h3cochoh+h2o2 8.20E+03 2.5 10750.0
4142. c2h3coch2oh+ch3o2=c2h3cochoh+ch3o2h 3.00E+12 0.0 17500.0
4143. c2h3cochoh+ho2=c2h3cohco+h2o2 4.00E+13 0.0 0.0

4144. c2h3cochoh+oh=c2h3cohco+h2o 5.00E+12 0.0 0.0
4145. c2h3cochoh+o=c2h3cohco+oh 1.00E+14 0.0 0.0
4146. c2h3cochoh+o2=c2h3cohco+ho2 1.00E+13 0.0 5564.0
4147. c2h3cochoh+m=c2h3cohco+h+m 1.00E+14 0.0 25000.0
4148. c2h3cohco+oh=h2o+c2h3coco 2.69E+10 0.8 -340.0
4149. c2h3cohco+h=h2+c2h3coco 4.00E+13 0.0 4200.0
4150. c2h3cohco+o=oh+c2h3coco 5.00E+12 0.0 1790.0
4151. c2h3cohco+ch3=ch4+c2h3coco 1.70E+12 0.0 8440.0
4152. c2h3cohco+ho2=h2o2+c2h3coco 2.80E+12 0.0 13600.0
4153. c2h3cohco+o2=ho2+c2h3coco 2.00E+13 0.5 42200.0
4154. c2h3coco+M=co+c2h3co+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4155. c4h9cohco+oh=h2o+c4h9coco 2.69E+10 0.8 -340.0
4156. c4h9cohco+h=h2+c4h9coco 4.00E+13 0.0 4200.0
4157. c4h9cohco+o=oh+c4h9coco 5.00E+12 0.0 1790.0
4158. c4h9cohco+ch3=ch4+c4h9coco 1.70E+12 0.0 8440.0
4159. c4h9cohco+ho2=h2o2+c4h9coco 2.80E+12 0.0 13600.0
4160. c4h9cohco+o2=ho2+c4h9coco 2.00E+13 0.5 42200.0
4161. c4h9coco+M=>co+nc4h9co+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4162. c4h9coco+ho2=>oh+co2+nc4h9co 2.00E+13 0.0 0.0
4163. c3h7coch2hco+oh=h2o+c3h7coch2co 2.69E+10 0.8 -340.0
4164. c3h7coch2hco+h=h2+c3h7coch2co 4.00E+13 0.0 4200.0
4165. c3h7coch2hco+o=oh+c3h7coch2co 5.00E+12 0.0 1790.0
4166. c3h7coch2hco+ch3=ch4+c3h7coch2co 1.70E+12 0.0 8440.0
4167. c3h7coch2hco+ho2=h2o2+c3h7coch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
4168. c3h7coch2hco+o2=ho2+c3h7coch2co 2.00E+13 0.5 42200.0
4169. c3h7coch2co+M=>co+nc3h7coch2+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4170. c3h7coch2co+ho2=>oh+co2+nc3h7coch2 2.00E+13 0.0 0.0
4171. c2h5coc2h4hco+oh=h2o+c2h5coc2h4co 2.69E+10 0.8 -340.0
4172. c2h5coc2h4hco+h=h2+c2h5coc2h4co 4.00E+13 0.0 4200.0
4173. c2h5coc2h4hco+o=oh+c2h5coc2h4co 5.00E+12 0.0 1790.0
4174. c2h5coc2h4hco+ch3=ch4+c2h5coc2h4co 1.70E+12 0.0 8440.0
4175. c2h5coc2h4hco+ho2=h2o2+c2h5coc2h4co 2.80E+12 0.0 13600.0
4176. c2h5coc2h4hco+o2=ho2+c2h5coc2h4co 2.00E+13 0.5 42200.0
4177. c2h5coc2h4co+M=>co+c2h5coc2h4p+M 8.64E+15 0.0 14400.0
4178. c2h5coc2h4co+ho2=>oh+co2+c2h5coc2h4p 2.00E+13 0.0 0.0
4179. nc10h22+phch2=Ac10h21+toluen 7.94E+11 0.0 20500.0
4180. nc10h22+phch2=Bc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
4181. nc10h22+phch2=Cc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
4182. nc10h22+phch2=Dc10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
4183. nc10h22+phch2=Ec10h21+toluen 7.94E+11 0.0 16200.0
4184. nc10h22+c6h5=Ac10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 20500.0
4185. nc10h22+c6h5=Bc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
4186. nc10h22+c6h5=Cc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
4187. nc10h22+c6h5=Dc10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
4188. nc10h22+c6h5=Ec10h21+c6h6 7.94E+11 0.0 16200.0
4189. cyc6h12+Ac10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.00E+11 0.0 13700.0
4190. cyc6h12+Bc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4191. cyc6h12+Cc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4192. cyc6h12+Dc10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4193. cyc6h12+Ec10h21=cyc6h11+nc10h22 4.52E-01 3.6 9141.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4194. cyc6h10+Ac10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.00E+11 0.0 13700.0
4195. cyc6h10+Bc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4196. cyc6h10+Cc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0

4197. cyc6h10+Dc10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4198. cyc6h10+Ec10h21=cyc6h9+nc10h22 2.00E+11 0.0 7300.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 11400.0
4199. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
4200. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4201. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4202. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4203. nc10h22+bbdtmpe1=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4204. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
4205. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4206. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4207. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4208. nc10h22+bbdtmpe3=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4209. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
4210. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4211. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4212. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4213. nc10h22+bddtmpe2=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4214. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Ac10h21 6.00E+11 0.0 13700.0
4215. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Bc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4216. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Cc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4217. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Dc10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4218. nc10h22+bddtmpe1=ic8h18+Ec10h21 4.00E+11 0.0 11400.0
4219. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Ac10h21 2.00E+12 0.0 18000.0
4220. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Bc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
4221. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Cc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
4222. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Dc10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
4223. nc10h22+ic4h7=ic4h8+Ec10h21 8.00E+11 0.0 16800.0
4224. nc3h7o2=nc3h7+o2 3.87E+18 -1.2 36080.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.52E+12 0.0 0.0
4225. ic3h7o2=ic3h7+o2 4.21E+16 -0.3 35910.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.54E+12 0.0 0.0
4226. ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4227. ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4228. nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4229. nc3h7+ho2=nc3h7o+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
4230. ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4231. ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4232. nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4233. ic3h7+ho2=ic3h7o+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
4234. ic3h7o2+acrol=c2h3co+ic3h7o2h 2.80E+12 0.0 13600.0
4235. ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h 1.13E+13 0.0 30430.0
4236. ic3h7o2+ethco=ic3h7o2h+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
4237. ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
4238. ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
4239. ic3h7o2+ch3hco=ic3h7o2h+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
4240. ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h 1.12E+13 0.0 24640.0
4241. ic3h7o2+h2=h+ic3h7o2h 3.01E+13 0.0 26030.0
4242. ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h 6.30E+12 0.0 19360.0
4243. ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4244. ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+c2h5o+o2 5.00E+10 0.0 0.0
4245. ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o 5.00E+10 0.0 0.0
4246. ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2 5.00E+10 0.0 0.0
4247. ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4248. ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4249. ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4250. ic3h7o2+ac3h5=ic3h7o+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4251. ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4252. nc3h7o2+acrol=c2h3co+nc3h7o2h 2.80E+12 0.0 13600.0
4253. nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h 1.13E+13 0.0 30430.0

4254. nc3h7o2+ethco=nc3h7o2h+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
4255. nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
4256. nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
4257. nc3h7o2+ch3hco=nc3h7o2h+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
4258. nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h 1.12E+13 0.0 24640.0
4259. nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h 3.01E+13 0.0 26030.0
4260. nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h 6.30E+12 0.0 19360.0
4261. nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4262. nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+c2h5o+o2 5.00E+10 0.0 0.0
4263. nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o 5.00E+10 0.0 0.0
4264. nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4265. nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4266. nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4267. nc3h7o2+ac3h5=nc3h7o+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4268. nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
4269. nc3h7o2=c3h6ooh1-3 3.75E+10 0.0 24400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 5.31E+12 -0.6 11180.0
4270. nc3h7o2=c3h6ooh1-2 2.00E+11 0.0 26850.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.90E+12 -0.2 17650.0
4271. ic3h7o2=c3h6ooh2-1 6.00E+11 0.0 29400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.70E+12 -0.5 14360.0
4272. nc3h7o2h=nc3h7o+oh 8.06E+19 -1.5 47000.0
4273. ic3h7o2h=ic3h7o+oh 8.42E+19 -1.4 46080.0
4274. ho2+ic3h7=nc3h7o2h 4.80E+12 0.0 0.0
4275. c3h6ooh1-2=c3h6o+oh 1.25E+15 -1.2 17580.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.96E+08 1.0 29090.0
4276. c3h6ooh1-3=c3h6o1-3+oh 4.31E+15 -1.3 18240.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.19E+18 -1.5 33770.0
4277. c3h6ooh2-1=c3h6o+oh 3.46E+16 -1.6 18870.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.79E+17 -1.5 33090.0
4278. c3h6ooh1-2=c3h6+ho2 7.33E+09 0.6 17860.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.47E+04 2.1 12160.0
4279. c3h6ooh2-1=c3h6+ho2 3.65E+12 0.1 20320.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.74E+03 2.3 11080.0
4280. c3h6ooh1-3=oh+ch2o+c2h4 1.16E+17 -1.1 32570.0
4281. c3h6ooh1-2+o2=c3h6ooh1-2o2 7.54E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.70E+20 -1.5 37610.0
4282. c3h6ooh1-3+o2=c3h6ooh1-3o2 4.52E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.21E+19 -1.3 35910.0
4283. c3h6ooh2-1+o2=c3h6ooh2-1o2 4.52E+12 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.00E+18 -1.3 35930.0
4284. c3h6ooh1-2o2=c3ket12+oh 2.00E+11 0.0 26400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.42E+07 0.6 48360.0
4285. c3h6ooh1-3o2=c3ket13+oh 2.50E+10 0.0 21400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.45E+05 1.0 51030.0
4286. c3h6ooh2-1o2=c3ket21+oh 1.00E+11 0.0 23850.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+05 1.1 49190.0
4287. c3ket12=ch3hco+hco+oh 1.05E+16 0.0 41600.0
4288. c3ket13=ch2o+ch2hco+oh 1.50E+16 0.0 42000.0
4289. c3ket21=ch2o+ch3co+oh 1.50E+16 0.0 42000.0
4290. c3h6o+h=>h2+ch2co+ch3 2.70E+07 2.0 5000.0
4291. c3h6o+oh=>h2o+ch2co+ch3 7.80E+06 2.0 -765.0
4292. c3h6o+ho2=>h2o2+ch2co+ch3 1.20E+12 0.0 15500.0
4293. c3h6o+ch3=>ch4+ch2co+ch3 6.00E+11 0.0 9600.0
4294. c3h6o+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3 6.00E+11 0.0 9600.0
4295. c3h6o+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3 6.00E+11 0.0 11000.0
4296. c3h6o+o=>oh+hco+c2h4 7.80E+13 0.0 5200.0
4297. c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4 2.70E+07 2.0 5000.0
4298. c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4 7.80E+06 2.0 -765.0
4299. c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4 1.20E+12 0.0 15500.0
4300. c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
4301. c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4 4.50E+12 0.0 17500.0
4302. c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4 6.00E+11 0.0 11000.0
4303. c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4 7.80E+13 0.0 5200.0
4304. c3h6o=c2h5+hco 2.45E+13 0.0 58500.0
4305. c3h6o=ethco 1.82E+14 0.0 58500.0
4306. c3h6o=ch3+ch3co 4.54E+13 0.0 59900.0
4307. c3h6o=ch3+ch2hco 2.45E+13 0.0 58820.0
4308. c3h6o=ch3+c2h3o 8.00E+15 0.0 92010.0
4309. c3h6o1-3+h=ch2ch2hco+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
4310. c3h6o1-3+oh=ch2ch2hco+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
4311. c3h6o1-3+ho2=ch2ch2hco+h2o2 1.20E+12 0.0 15500.0
4312. c3h6o1-3+ch3=ch2ch2hco+ch4 6.00E+11 0.0 9600.0
4313. c3h6o1-3=ethco 1.82E+14 0.0 58500.0
4314. c2h4+hco=ch2ch2hco 2.11E+11 0.0 7350.0
4315. ch2ch2hco+o2=o2c2h4hco 9.00E+18 -2.5 0.0
4316. o2c2h4hco+ho2=>ho2c2h4hco+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4317. o2c2h4hco=ho2c2h4co 5.34E+05 1.9 20273.5
4318. ho2c2h4co=co+c2h4o2h 2.00E+13 0.0 28700.0
4319. ho2c2h4hco=>oc2h4hco+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4320. ch2o+ch2hco=oc2h4hco 1.50E+11 0.0 11900.0
4321. pc4h9+o2=c4h9qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
4322. sc4h9+o2=c4h9qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
4323. c4h9qjA=c4h8rBqA 3.30E+09 1.0 32500.0
4324. c4h9qjA=c4h8rCqA 5.70E+08 1.0 25000.0
4325. c4h9qjA=c4h8rDqA 1.50E+08 1.0 25000.0
4326. c4h9qjB=c4h8rDqB 8.60E+08 1.0 28000.0
4327. c4h9qjB=c4h8rAqB 5.00E+09 1.0 35500.0
4328. c4h9qjB=c4h8rCqB 3.30E+09 1.0 32500.0
4329. c4h9qjA+ho2=nc4h9o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4330. c4h9qjB+ho2=nc4h9o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4331. c4h8rDqA=c2h4+c2h4o2h 2.00E+13 0.0 28700.0
4332. c4h8rDqA=c4h8rAqA 5.70E+08 1.0 15300.0
4333. c4h8rDqB=c4h8rAqB 8.60E+08 1.0 19800.0
4334. c4h8rAqA+o2=c4h8qjAqA 9.00E+18 -2.5 0.0
4335. c4h8rBqA+o2=c4h8qjBqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4336. c4h8rCqA+o2=c4h8qjCqA 1.70E+19 -2.5 0.0
4337. c4h8rDqA+o2=c4h8qjDqA 9.00E+18 -2.5 0.0
4338. c4h8rAqB+o2=c4h8qjAqB 1.50E+18 -2.5 0.0
4339. c4h8rCqB+o2=c4h8qjCqB 1.05E+19 -2.5 0.0
4340. c4h8rDqB+o2=c4h8qjDqB 9.00E+18 -2.5 0.0
4341. c4h8rCqA=>oh+ch2o+c3h6 9.14E+10 1.1 28014.0
4342. c4h8rDqB=>oh+ch3hco+c2h4 1.67E+14 0.0 28684.0
4343. c4h8rAqA=oh+nc3h7hco 1.00E+09 0.0 7500.0
4344. c4h8rBqA=oh+c4h8o#3 6.10E+11 0.0 17950.0
4345. c4h8rCqA=oh+c4h8o#4 9.20E+10 0.0 16600.0
4346. c4h8rDqA=oh+c4h8o#5 2.10E+08 0.0 6500.0
4347. c4h8rAqB=oh+c4h8o#3 6.10E+11 0.0 17950.0
4348. c4h8rCqB=oh+c4h8o#3 6.10E+11 0.0 17950.0
4349. c4h8rDqB=oh+c4h8o#4 9.20E+10 0.0 16600.0
4350. c4h8rBqA=ho2+c4h8 8.50E+12 0.0 26000.0
4351. c4h8rAqB=ho2+c4h8 8.50E+12 0.0 26000.0
4352. c4h8rCqB=ho2+c4h8 8.50E+12 0.0 26000.0
4353. c4h8qjBqA=oh+c4h7oAqB 3.35E+09 1.0 32500.0
4354. c4h8qjCqA=oh+c4h7oAqC 5.75E+08 1.0 25000.0
4355. c4h8qjDqA=oh+c4h7oAqD 9.89E+07 1.0 22000.0
4356. c4h8qjAqB=oh+c4h7oBqA 1.68E+09 1.0 29500.0
4357. c4h8qjCqB=oh+c4h7oBqC 1.68E+09 1.0 29500.0
4358. c4h8qjDqB=oh+c4h7oBqD 2.88E+08 1.0 22000.0
4359. nc4h9o2h=>oh+ch3hco+c2h5 1.50E+16 0.0 42000.0
4360. c4h7oAqB=>oh+hco+ethco 7.50E+15 0.0 44500.0
4361. c4h7oAqC=>oh+ch2hco+ch3hco 7.50E+15 0.0 44500.0
4362. c4h7oAqD=>oh+ch2o+ch2ch2hco 7.50E+15 0.0 44500.0
4363. c4h7oBqA=>oh+ch2o+c2h5co 7.50E+15 0.0 44500.0
4364. c4h7oBqC=>oh+ch3co+ch3hco 7.50E+15 0.0 44500.0
4365. c4h7oBqD=>oh+ch2o+ch2coch3 7.50E+15 0.0 44500.0
4366. c4h8o#3+h=>h2+ch2co+c2h5 2.40E+08 1.5 2005.0
4367. c4h8o#3+oh=>h2o+ch2co+c2h5 1.20E+06 2.0 -1192.0
4368. c4h8o#3+ho2=>h2o2+ch2co+c2h5 1.00E+04 2.5 9400.0
4369. c4h8o#4+h=>h2+c3h6+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4370. c4h8o#4+oh=>h2o+c3h6+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4371. c4h8o#4+ho2=>h2o2+c3h6+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4372. c4h8o#4+h=h2+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
4373. c4h8o#4+oh=h2o+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
4374. c4h8o#4+ho2=h2o2+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
4375. c4h8o#5+h=h2+c3h6cho-1 9.60E+08 1.5 2785.0
4376. c4h8o#5+oh=h2o+c3h6cho-1 4.80E+06 2.0 -1192.0
4377. c4h8o#5+ho2=h2o2+c3h6cho-1 5.00E+04 2.5 11605.0
4378. butanone+h=>h2+c2h5coch2 2.70E+07 2.0 5000.0
4379. butanone+oh=>h2o+c2h5coch2 7.80E+06 2.0 -765.0
4380. butanone+ho2=>h2o2+c2h5coch2 1.20E+12 0.0 15500.0
4381. butanone+ch3=>ch4+c2h5coch2 6.00E+11 0.0 9600.0
4382. butanone+ch3o2=>ch3o2h+c2h5coch2 6.00E+11 0.0 9600.0
4383. butanone+c2h5=>c2h6+c2h5coch2 6.00E+11 0.0 11000.0
4384. c2h5coch2=ch2co+c2h5 1.57E+13 0.0 30000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.11E+11 0.0 7350.0
4385. c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
4386. c2h5coch2o2+ho2=c2h5coch2o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4387. c2h5coch2o2h=c2h5coch2o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4388. ch2o+c2h5co=c2h5coch2o 1.50E+11 0.0 11900.0
4389. ch3coc2h4p=c2h4+ch3co 5.97E+12 0.0 20730.0
4390. ch3coc2h4p+o2=ch3coc2h4o2 9.00E+18 -2.5 0.0
4391. ch3coc2h4o2+ho2=ch3coc2h4o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4392. ch3coc2h4o2h=ch3coc2h4o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4393. ch2o+ch2cooch3=ch3coc2h4o 1.50E+11 0.0 11900.0
4394. ch3coc2h4p+o2=mvk+ho2 3.80E+10 0.0 -2000.0
4395. Ac5h11+o2=c5h11qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
4396. Bc5h11+o2=c5h11qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
4397. Cc5h11+o2=c5h11qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
4398. c5h11qjA=c5h10rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
4399. c5h11qjA=c5h10rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
4400. c5h11qjA=c5h10rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
4401. c5h11qjA=c5h10rEqA 4.35E+06 1.0 24000.0
4402. c5h11qjB=c5h10rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
4403. c5h11qjB=c5h10rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
4404. c5h11qjB=c5h10rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
4405. c5h11qjB=c5h10rEqB 2.55E+07 1.0 25000.0
4406. c5h11qjC=c5h10rAqC 2.97E+08 1.0 28000.0
4407. c5h11qjC=c5h10rBqC 1.14E+09 1.0 32500.0
4408. c5h11qjA+ho2=nc5h11o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4409. c5h11qjB+ho2=nc5h11o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4410. c5h11qjC+ho2=nc5h11o2h+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4411. c5h10rAqA+o2=c5h10qjAqA 9.00E+18 -2.5 0.0
4412. c5h10rBqA+o2=c5h10qjBqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4413. c5h10rCqA+o2=c5h10qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4414. c5h10rDqA+o2=c5h10qjDqA 1.70E+19 -2.5 0.0
4415. c5h10rEqA+o2=c5h10qjEqA 9.00E+18 -2.5 0.0
4416. c5h10rAqB+o2=c5h10qjAqB 1.50E+18 -2.5 0.0
4417. c5h10rBqB+o2=c5h10qjBqB 1.80E+19 -2.5 0.0
4418. c5h10rCqB+o2=c5h10qjCqB 1.05E+19 -2.5 0.0
4419. c5h10rDqB+o2=c5h10qjDqB 1.70E+19 -2.5 0.0
4420. c5h10rEqB+o2=c5h10qjEqB 9.00E+18 -2.5 0.0
4421. c5h10rAqC+o2=c5h10qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
4422. c5h10rBqC+o2=c5h10qjBqC 9.50E+18 -2.5 0.0
4423. c5h10rCqA=>oh+ch2o+c4h8 1.35E+12 0.8 28207.0
4424. c5h10rAqC=>oh+ethco+c2h4 1.12E+14 0.1 30960.0
4425. c5h10rDqB=>oh+ch3hco+c3h6 6.44E+13 0.2 28013.0
4426. c5h10rAqA=oh+nc4h9hco 1.00E+09 0.0 7500.0
4427. c5h10rBqB=oh+c3h7coch3 1.00E+09 0.0 7500.0
4428. c5h10rBqA=oh+c5h10o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4429. c5h10rCqA=oh+c5h10o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4430. c5h10rDqA=oh+c5h10o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4431. c5h10rEqA=oh+c5h10o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
4432. c5h10rAqB=oh+c5h10o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4433. c5h10rCqB=oh+c5h10o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4434. c5h10rDqB=oh+c5h10o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
4435. c5h10rEqB=oh+c5h10o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4436. c5h10rAqC=oh+c5h10o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4437. c5h10rBqC=oh+c5h10o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4438. c5h10rAqB=ho2+c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4439. c5h10rBqA=ho2+c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4440. c5h10rBqC=ho2+c2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4441. c5h10rBqC=ho2+t2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4442. c5h10rCqB=ho2+c2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4443. c5h10rCqB=ho2+t2c5h10 8.50E+12 0.0 26000.0
4444. c5h10qjBqA=oh+c5h9oAqB 3.35E+09 1.0 32500.0
4445. c5h10qjCqA=oh+c5h9oAqC 9.89E+07 1.0 22000.0
4446. c5h10qjDqA=oh+c5h9oAqD 9.89E+07 1.0 22000.0
4447. c5h10qjEqA=oh+c5h9oAqE 1.70E+07 1.0 21000.0
4448. c5h10qjAqB=oh+c5h9oBqA 1.68E+09 1.0 29500.0
4449. c5h10qjCqB=oh+c5h9oBqC 1.68E+09 1.0 29500.0
4450. c5h10qjDqB=oh+c5h9oBqD 2.88E+08 1.0 22000.0
4451. c5h10qjEqB=oh+c5h9oBqE 4.94E+07 1.0 19000.0
4452. c5h10qjAqC=oh+c5h9oCqA 2.88E+08 1.0 22000.0
4453. c5h10qjBqC=oh+c5h9oCqB 1.68E+09 1.0 29500.0
4454. nc5h11o2h=>oh+ch2o+pc4h9 1.50E+16 0.0 42000.0
4455. c5h9oAqA=oh+co2+pc4h9 1.00E+16 0.0 43000.0
4456. c5h9oAqB=oh+hco+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4457. c5h9oAqC=oh+ch2hco+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
4458. c5h9oAqD=oh+ch3hco+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4459. c5h9oAqE=oh+ch2o+c3h6cho-1 1.00E+16 0.0 43000.0
4460. c5h9oBqA=oh+ch2o+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
4461. c5h9oBqC=oh+ch3co+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
4462. c5h9oBqD=oh+ch3hco+ch2coch3 1.00E+16 0.0 43000.0
4463. c5h9oBqE=oh+c2h4+ch3co+ch2o 1.00E+16 0.0 43000.0
4464. c5h9oCqA=oh+c2h5+ch2co+ch2o 1.00E+16 0.0 43000.0
4465. c5h9oCqB=oh+c2h5co+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4466. c5h10o-AB+h=>h2+acrol+c2h5 4.80E+08 1.5 2785.0
4467. c5h10o-AB+oh=>h2o+acrol+c2h5 2.40E+06 2.0 -1192.0
4468. c5h10o-AB+ho2=>h2o2+acrol+c2h5 2.50E+04 2.5 11605.0
4469. c5h10o-AB+h=>h2+nc3h7coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
4470. c5h10o-AB+oh=>h2o+nc3h7coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
4471. c5h10o-AB+ho2=>h2o2+nc3h7coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
4472. c5h10o-BC+h=>h2+ch3+mvk 2.40E+08 1.5 2005.0
4473. c5h10o-BC+oh=>h2o+ch3+mvk 1.20E+06 2.0 -1192.0
4474. c5h10o-BC+ho2=>h2o2+ch3+mvk 1.00E+04 2.5 9400.0
4475. c5h10o-BC+h=>h2+ch3chco+c2h5 2.40E+08 1.5 2005.0
4476. c5h10o-BC+oh=>h2o+ch3chco+c2h5 1.20E+06 2.0 -1192.0
4477. c5h10o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+c2h5 1.00E+04 2.5 9400.0
4478. c5h10o-AC+h=>h2+c4h8+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4479. c5h10o-AC+oh=>h2o+c4h8+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4480. c5h10o-AC+ho2=>h2o2+c4h8+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4481. c5h10o-AC+h=>h2+c2h4+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
4482. c5h10o-AC+oh=>h2o+c2h4+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0

4483. c5h10o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
4484. c5h10o-BD+h=>h2+c3h6+ch3co 4.80E+08 1.5 2005.0
4485. c5h10o-BD+oh=>h2o+c3h6+ch3co 2.40E+06 2.0 -1192.0
4486. c5h10o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+ch3co 2.00E+04 2.5 9400.0
4487. c5h10o-AD+h=>h2+c3h6+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4488. c5h10o-AD+oh=>h2o+c3h6+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4489. c5h10o-AD+ho2=>h2o2+c3h6+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4490. c5h10o-AD+h=>h2+c2h4+ch2coch3 2.40E+08 1.5 2005.0
4491. c5h10o-AD+oh=>h2o+c2h4+ch2coch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
4492. c5h10o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
4493. c5h10o-AE+h=>h2+c2h4+ch2ch2hco 9.60E+08 1.5 2785.0
4494. c5h10o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch2ch2hco 4.80E+06 2.0 -1192.0
4495. c5h10o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch2ch2hco 5.00E+04 2.5 11605.0
4496. c4h7hco-1+h=h2+c4h7co-1 4.00E+13 0.0 4200.0
4497. c4h7hco-1+oh=h2o+c4h7co-1 4.20E+12 0.0 500.0
4498. c4h7hco-1+ho2=h2o2+c4h7co-1 1.00E+12 0.0 10000.0
4499. c4h7hco-1+ch3=ch4+c4h7co-1 2.00E-06 5.6 2500.0
4500. c4h7hco-1+c2h5=c2h6+c4h7co-1 1.30E+12 0.0 8500.0
4501. c4h7co-1=>co+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 28700.0
4502. c4h7co-1+ho2=>co2+oh+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 0.0
4503. c4h7hco-2+h=h2+c4h7co-2 4.00E+13 0.0 4200.0
4504. c4h7hco-2+oh=h2o+c4h7co-2 4.20E+12 0.0 500.0
4505. c4h7hco-2+ho2=h2o2+c4h7co-2 1.00E+12 0.0 10000.0
4506. c4h7hco-2+ch3=ch4+c4h7co-2 2.00E-06 5.6 2500.0
4507. c4h7hco-2+c2h5=c2h6+c4h7co-2 1.30E+12 0.0 8500.0
4508. c4h7co-2=>co+Cc4h7-1 2.00E+13 0.0 28700.0
4509. c4h7co-2+ho2=>co2+oh+Cc4h7-1 2.00E+13 0.0 0.0
4510. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-1+h2o 2.06E+07 1.7 753.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.60E+06 1.8 20170.0
4511. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-1+h2o2 2.38E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.46E+04 2.2 4442.0
4512. c3h7coch3+o=c3h6coch3-1+oh 2.25E+13 0.0 7700.0
4513. c3h7coch3+h=c3h6coch3-1+h2 9.16E+06 2.0 7700.0
4514. c3h7coch3+o2=c3h6coch3-1+ho2 2.05E+13 0.0 51310.0
4515. c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-1+ch4 3.19E+01 3.2 7172.0
4516. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-2+h2o 3.62E+07 1.6 -247.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.67E+05 2.0 21660.0
4517. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-2+h2o2 5.60E+12 0.0 17700.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.37E+11 0.1 8142.0
4518. c3h7coch3+oh=c3h6coch3-3+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.37E+13 -0.3 28700.0
4519. c3h7coch3+ho2=c3h6coch3-3+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.33E+13 -0.6 6160.0
4520. c3h7coch3+o=c3h6coch3-3+oh 3.07E+13 0.0 3400.0
4521. c3h7coch3+h=c3h6coch3-3+h2 4.46E+06 2.0 3200.0
4522. c3h7coch3+o2=c3h6coch3-3+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
4523. c3h7coch3+ch3=c3h6coch3-3+ch4 1.74E+00 3.5 3680.0
4524. c3h7coch3+oh=nc3h7coch2+h2o 5.10E+11 0.0 1192.0
Reverse Arrhenius coefficients: 9.29E+13 -0.7 27730.0
4525. c3h7coch3+ho2=nc3h7coch2+h2o2 2.38E+04 2.5 14690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.57E+07 1.5 9762.0
4526. c3h7coch3+o=nc3h7coch2+oh 5.00E+12 0.0 5962.0
4527. c3h7coch3+h=nc3h7coch2+h2 9.30E+12 0.0 6357.0
4528. c3h7coch3+o2=nc3h7coch2+ho2 2.05E+13 0.0 49150.0
4529. c3h7coch3+ch3=nc3h7coch2+ch4 1.62E+11 0.0 9630.0
4530. c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2-1 9.00E+18 -2.5 0.0
4531. ch3coc3h6o2-1+ho2=ch3coc3h6o2h-1+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4532. ch3coc3h6o2h-1=ch3coc3h6o-1+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4533. ch2o+ch3coc2h4p=ch3coc3h6o-1 1.50E+11 0.0 11900.0
4534. c3h6coch3-1=c2h4+ch2coch3 2.90E+16 -1.2 27000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 8600.0
4535. c3h6coch3-2=c3h6+ch3co 2.72E+16 -1.1 25590.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
4536. c3h6coch3-3=mvk+ch3 9.62E+15 -0.8 32390.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 7800.0
4537. nc3h7coch2=nc3h7+ch2co 1.23E+18 -1.4 43450.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 11600.0
4538. nc3h7coch2+o2=nc3h7coch2o2 9.00E+18 -2.5 0.0
4539. nc3h7coch2o2+ho2=nc3h7coch2o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4540. nc3h7coch2o2h=nc3h7coch2o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4541. ch2o+c3h7co=nc3h7coch2o 1.50E+11 0.0 11900.0
4542. c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4p+h2o 1.05E+10 1.0 1586.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.19E+09 0.9 21030.0
4543. c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4p+h2o2 4.76E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+04 2.2 4472.0
4544. c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4p+ho2 4.10E+13 0.0 51310.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.95E+10 0.3 -1882.0
4545. c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4p+h2 1.83E+07 2.0 7700.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.79E+05 2.0 11990.0
4546. c2h5coc2h5+oh=c2h5coc2h4s+h2o 1.69E+12 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.30E+13 -0.3 28740.0
4547. c2h5coc2h5+ho2=c2h5coc2h4s+h2o2 4.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.63E+13 -0.7 6200.0
4548. c2h5coc2h5+o2=c2h5coc2h4s+ho2 3.10E+13 0.0 41970.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.54E+12 0.0 -1702.0
4549. c2h5coc2h5+h=c2h5coc2h4s+h2 8.96E+06 2.0 3200.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.04E+07 1.7 17010.0
4550. c2h5coc2h4s=c2h5coc2h3+h 8.70E+16 -0.8 42130.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.30E+13 0.0 1560.0
4551. c2h5coc2h4p=c2h5co+c2h4 1.55E+17 -1.5 27840.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.00E+10 0.0 9600.0
4552. c2h5coc2h4p+o2=c2h5coc2h4o2 9.00E+18 -2.5 0.0
4553. c2h5coc2h4o2+ho2=c2h5coc2h4o2h+o2 2.29E+11 0.0 -1790.0
4554. c2h5coc2h4o2h=c2h5coc2h4o+oh 1.50E+16 0.0 42500.0
4555. ch2o+c2h5coch2=c2h5coc2h4o 1.50E+11 0.0 11900.0
4556. c2h5coc2h3=>c2h3+c2h5co 7.94E+17 0.0 84456.0
4557. c2h5coc2h3=>c2h3co+c2h5 7.94E+17 0.0 84456.0
4558. c2h5coc2h3+oh=c2h5coch2+ch2o 1.00E+10 0.0 0.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.67E+11 -0.4 18220.0
4559. c2h5coc2h3+ho2=c2h5co+ch2hco+oh 6.03E+09 0.0 7949.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+00 0.0 0.0
4560. c2h5coc2h3+ch3o2=c2h5co+ch2hco+ch3o 3.97E+11 0.0 17050.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+00 0.0 0.0
4561. c2h5coc2h3+oh=pc2h4coc2h3+h2o 7.55E+09 1.0 1586.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.28E+08 2.5 20210.0
4562. c2h5coc2h3+ho2=pc2h4coc2h3+h2o2 2.38E+04 2.5 16490.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.40E+03 3.8 3652.0
4563. c2h5coc2h3+ch3o2=pc2h4coc2h3+ch3o2h 3.01E+12 0.0 19380.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.25E+12 1.1 5822.0
4564. c2h5coc2h3+o2=pc2h4coc2h3+ho2 2.05E+13 0.0 51310.0
4565. c2h5coc2h3+h=pc2h4coc2h3+h2 9.16E+06 2.0 7700.0
4566. c2h5coc2h3+c2h3=pc2h4coc2h3+c2h4 5.00E+11 0.0 10400.0
4567. c2h5coc2h3+c2h5=pc2h4coc2h3+c2h6 5.00E+10 0.0 13400.0
4568. c2h5coc2h3+ch3o=pc2h4coc2h3+ch3oh 2.17E+11 0.0 6460.0
4569. c2h5coc2h3+oh=sc2h4coc2h3+h2o 8.45E+11 0.0 -228.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.35E+13 -0.2 28600.0
4570. c2h5coc2h3+ho2=sc2h4coc2h3+h2o2 2.00E+11 0.0 8698.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.90E+13 -0.5 6065.0
4571. c2h5coc2h3+ch3o2=sc2h4coc2h3+ch3o2h 2.00E+12 0.0 15250.0
Reverse Arrhenius coefficients: 7.79E+14 -0.7 11900.0
4572. c2h5coc2h3+o2=sc2h4coc2h3+ho2 1.55E+13 0.0 41970.0
4573. c2h5coc2h3+h=sc2h4coc2h3+h2 4.48E+06 2.0 3200.0
4574. c2h5coc2h3+c2h3=sc2h4coc2h3+c2h4 3.00E+11 0.0 5600.0
4575. c2h5coc2h3+c2h5=sc2h4coc2h3+c2h6 3.00E+10 0.0 8600.0
4576. c2h5coc2h3+ch3o=sc2h4coc2h3+ch3oh 1.45E+11 0.0 2771.0
4577. pc2h4coc2h3=c2h3co+c2h4 5.26E+14 0.4 21460.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.00E+10 0.0 11300.0
4578. sc2h4coc2h3=ch3chco+c2h3 1.64E+16 -0.7 54590.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.00E+10 0.0 12600.0
4579. c2h3+c2h3co=divinket 3.12E+14 -0.5 0.0
4580. c4h8hco-2=c3h6+ch2hco 2.00E+13 0.0 24367.3
4581. c4h8hco-2+o2=c4h7hco-1+ho2 7.50E+09 0.0 -2000.0
4582. c4h8hco-2+o2=c4h7hco-2+ho2 1.80E+10 0.0 -2000.0
4583. Ac6h13+o2=c6h13qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
4584. Bc6h13+o2=c6h13qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
4585. Cc6h13+o2=c6h13qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
4586. Ac6h13+ho2=c6h13ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4587. Bc6h13+ho2=c6h13ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4588. Cc6h13+ho2=c6h13ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4589. Ac6h13+ch3o2=c6h13ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4590. Bc6h13+ch3o2=c6h13ojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4591. Cc6h13+ch3o2=c6h13ojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4592. Ac6h13+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4593. Bc6h13+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4594. Cc6h13+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4595. Ac6h13+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4596. Bc6h13+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4597. Cc6h13+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4598. Ac6h13+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4599. Ac6h13+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4600. Ac6h13+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4601. Bc6h13+c6h13qjA=c6h13ojB+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4602. Bc6h13+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4603. Bc6h13+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4604. Cc6h13+c6h13qjA=c6h13ojC+c6h13ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4605. Cc6h13+c6h13qjB=c6h13ojC+c6h13ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4606. Cc6h13+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4607. c6h13ojA=ch2o+Ac5h11 7.17E+17 -1.3 15013.0
4608. c6h13ojB=ch3hco+pc4h9 4.18E+12 0.4 10821.0
4609. c6h13ojB=ch3+nc4h9hco 7.00E+11 0.6 15365.0
4610. c6h13ojC=ethco+nc3h7 5.28E+12 0.4 10946.0
4611. c6h13ojC=c2h5+nc3h7hco 2.37E+16 -0.6 10837.0
4612. c6h13qA=oh+c6h13ojA 1.50E+16 0.0 42500.0
4613. c6h13qB=oh+c6h13ojB 1.25E+16 0.0 41600.0
4614. c6h13qC=oh+c6h13ojC 1.25E+16 0.0 41600.0
4615. c6h13qjA=c6h12rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
4616. c6h13qjA=c6h12rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
4617. c6h13qjA=c6h12rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
4618. c6h13qjA=c6h12rEqA 2.90E+06 1.0 21000.0
4619. c6h13qjB=c6h12rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
4620. c6h13qjB=c6h12rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
4621. c6h13qjB=c6h12rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
4622. c6h13qjB=c6h12rEqB 1.70E+07 1.0 22000.0
4623. c6h13qjB=c6h12rFqB 4.35E+06 1.0 24000.0
4624. c6h13qjC=c6h12rAqC 1.48E+08 1.0 28000.0
4625. c6h13qjC=c6h12rBqC 5.70E+08 1.0 32500.0
4626. c6h13qjC=c6h12rDqC 5.70E+08 1.0 32500.0
4627. c6h13qjC=c6h12rEqC 9.90E+07 1.0 25000.0
4628. c6h13qjC=c6h12rFqC 2.53E+07 1.0 25000.0
4629. c6h13qjA+ho2=c6h13qA+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4630. c6h13qjB+ho2=c6h13qB+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4631. c6h13qjC+ho2=c6h13qC+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4632. c6h13qjA+ho2=c6h13ojA+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4633. c6h13qjB+ho2=c6h13ojB+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4634. c6h13qjC+ho2=c6h13ojC+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4635. c6h13qjA+ch3o2=c6h13ojA+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4636. c6h13qjB+ch3o2=c6h13ojB+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4637. c6h13qjC+ch3o2=c6h13ojC+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4638. c6h13qjA+c2h5o2=c6h13ojA+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4639. c6h13qjB+c2h5o2=c6h13ojB+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4640. c6h13qjC+c2h5o2=c6h13ojC+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4641. c6h13qjA+nc3h7o2=c6h13ojA+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4642. c6h13qjB+nc3h7o2=c6h13ojB+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4643. c6h13qjC+nc3h7o2=c6h13ojC+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4644. c6h13qjA+c6h13qjA=c6h13ojA+c6h13ojA+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4645. c6h13qjA+c6h13qjB=c6h13ojA+c6h13ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4646. c6h13qjA+c6h13qjC=c6h13ojA+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4647. c6h13qjB+c6h13qjB=c6h13ojB+c6h13ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4648. c6h13qjB+c6h13qjC=c6h13ojB+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4649. c6h13qjC+c6h13qjC=c6h13ojC+c6h13ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4650. c6h12rBqA+o2=c6h12qjBqA 1.70E+19 -2.5 0.0
4651. c6h12rCqA+o2=c6h12qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4652. c6h12rDqA+o2=c6h12qjDqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4653. c6h12rEqA+o2=c6h12qjEqA 1.70E+19 -2.5 0.0
4654. c6h12rAqB+o2=c6h12qjAqB 9.00E+18 -2.5 0.0
4655. c6h12rCqB+o2=c6h12qjCqB 1.80E+19 -2.5 0.0
4656. c6h12rDqB+o2=c6h12qjDqB 1.80E+19 -2.5 0.0
4657. c6h12rEqB+o2=c6h12qjEqB 1.70E+19 -2.5 0.0
4658. c6h12rFqB+o2=c6h12qjFqB 9.00E+18 -2.5 0.0
4659. c6h12rAqC+o2=c6h12qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
4660. c6h12rBqC+o2=c6h12qjBqC 1.70E+19 -2.5 0.0
4661. c6h12rDqC+o2=c6h12qjDqC 1.80E+19 -2.5 0.0
4662. c6h12rEqC+o2=c6h12qjEqC 1.70E+19 -2.5 0.0
4663. c6h12rFqC+o2=c6h12qjFqC 9.00E+18 -2.5 0.0
4664. c6h12rAqC=>oh+c2h4+nc3h7hco 5.00E+13 0.0 25500.0
4665. c6h12rCqA=>oh+ch2o+c5h10 5.00E+13 0.0 25500.0
4666. c6h12rDqB=>oh+ch3hco+c4h8 5.00E+13 0.0 25500.0
4667. c6h12rEqC=>oh+c3h6+ethco 5.00E+13 0.0 25500.0
4668. c6h12rBqA=oh+c6h12o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4669. c6h12rCqA=oh+c6h12o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4670. c6h12rDqA=oh+c6h12o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4671. c6h12rEqA=oh+c6h12o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
4672. c6h12rAqB=oh+c6h12o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4673. c6h12rCqB=oh+c6h12o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4674. c6h12rDqB=oh+c6h12o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
4675. c6h12rEqB=oh+c6h12o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
4676. c6h12rFqB=oh+c6h12o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
4677. c6h12rBqC=oh+c6h12o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4678. c6h12rAqC=oh+c6h12o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4679. c6h12rDqC=oh+c6h12o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
4680. c6h12rEqC=oh+c6h12o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
4681. c6h12rFqC=oh+c6h12o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4682. ho2+c6h12-1=c6h12rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0
4683. ho2+c6h12-1=c6h12rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
4684. ho2+c6h12-2=c6h12rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
4685. ho2+c6h12-2=c6h12rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
4686. ho2+c6h12-3=c6h12rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
4687. c6h12qjBqA=oh+c6h11oAqB 3.35E+09 1.0 33500.0
4688. c6h12qjCqA=oh+c6h11oAqC 5.75E+08 1.0 26000.0
4689. c6h12qjDqA=oh+c6h11oAqD 9.89E+07 1.0 23000.0
4690. c6h12qjEqA=oh+c6h11oAqE 1.70E+07 1.0 22000.0
4691. c6h12qjAqB=oh+c6h11oBqA 1.68E+09 1.0 30500.0
4692. c6h12qjCqB=oh+c6h11oBqC 1.68E+09 1.0 30500.0
4693. c6h12qjDqB=oh+c6h11oBqD 2.88E+08 1.0 23000.0

4694. c6h12qjEqB=oh+c6h11oBqE 4.94E+07 1.0 20000.0
4695. c6h12qjFqB=oh+c6h11oBqF 8.50E+06 1.0 19000.0
4696. c6h12qjAqC=oh+c6h11oCqA 2.88E+08 1.0 23000.0
4697. c6h12qjBqC=oh+c6h11oCqB 1.68E+09 1.0 30500.0
4698. c6h12qjDqC=oh+c6h11oCqD 1.68E+09 1.0 30500.0
4699. c6h12qjEqC=oh+c6h11oCqE 2.88E+08 1.0 23000.0
4700. c6h12qjFqC=oh+c6h11oCqF 4.94E+07 1.0 20000.0
4701. c6h11oAqB=>oh+hco+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4702. c6h11oAqC=>oh+ch2hco+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4703. c6h11oAqD=>oh+ethco+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4704. c6h11oAqE=>oh+ch3hco+c3h6cho-1 1.00E+16 0.0 43000.0
4705. c6h11oBqA=>oh+ch2o+nc4h9co 1.00E+16 0.0 43000.0
4706. c6h11oBqC=>oh+ch3co+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4707. c6h11oBqD=>oh+ethco+ch2coch3 1.00E+16 0.0 43000.0
4708. c6h11oBqE=>oh+ch3hco+ch3coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
4709. c6h11oBqF=>oh+ch2o+c3h6coch3-1 1.00E+16 0.0 43000.0
4710. c6h11oCqA=>oh+ch2o+nc3h7coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
4711. c6h11oCqB=>oh+ch3hco+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
4712. c6h11oCqD=>oh+ethco+c2h5co 1.00E+16 0.0 43000.0
4713. c6h11oCqE=>oh+ch3hco+c2h5coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
4714. c6h11oCqF=>oh+ch2o+c2h5coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
4715. c6h12o-AB+h=>h2+acrol+nc3h7 4.80E+08 1.5 2785.0
4716. c6h12o-AB+oh=>h2o+acrol+nc3h7 2.40E+06 2.0 -1192.0
4717. c6h12o-AB+ho2=>h2o2+acrol+nc3h7 2.50E+04 2.5 11605.0
4718. c6h12o-AB+h=>h2+ch2co+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
4719. c6h12o-AB+oh=>h2o+ch2co+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
4720. c6h12o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
4721. c6h12o-BC+h=>h2+mvk+c2h5 2.40E+08 1.5 2005.0
4722. c6h12o-BC+oh=>h2o+mvk+c2h5 1.20E+06 2.0 -1192.0
4723. c6h12o-BC+ho2=>h2o2+mvk+c2h5 1.00E+04 2.5 9400.0
4724. c6h12o-BC+h=>h2+ch3chco+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
4725. c6h12o-BC+oh=>h2o+ch3chco+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
4726. c6h12o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
4727. c6h12o-CD+h=>h2+ch3+c2h5coc2h3 4.80E+08 1.5 2005.0
4728. c6h12o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h5coc2h3 2.40E+06 2.0 -1192.0
4729. c6h12o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h5coc2h3 2.00E+04 2.5 9400.0
4730. c6h12o-AC+h=>h2+c5h10+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4731. c6h12o-AC+oh=>h2o+c5h10+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4732. c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c5h10+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4733. c6h12o-AC+h=>h2+c2h4+c3h7co 2.40E+08 1.5 2005.0
4734. c6h12o-AC+oh=>h2o+c2h4+c3h7co 1.20E+06 2.0 -1192.0
4735. c6h12o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c3h7co 1.00E+04 2.5 9400.0
4736. c6h12o-BD+h=>h2+c4h8+ch3co 2.40E+08 1.5 2005.0
4737. c6h12o-BD+oh=>h2o+c4h8+ch3co 1.20E+06 2.0 -1192.0
4738. c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c4h8+ch3co 1.00E+04 2.5 9400.0
4739. c6h12o-BD+h=>h2+c3h6+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
4740. c6h12o-BD+oh=>h2o+c3h6+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
4741. c6h12o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
4742. c6h12o-AD+h=>h2+c4h8+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4743. c6h12o-AD+oh=>h2o+c4h8+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4744. c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c4h8+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4745. c6h12o-AD+h=>h2+c2h4+c2h5coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
4746. c6h12o-AD+oh=>h2o+c2h4+c2h5coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
4747. c6h12o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
4748. c6h12o-BE+h=>h2+c3h6+ch2coch3 4.80E+08 1.5 2005.0
4749. c6h12o-BE+oh=>h2o+c3h6+ch2coch3 2.40E+06 2.0 -1192.0
4750. c6h12o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
4751. c6h12o-AE+h=>h2+c3h6+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
4752. c6h12o-AE+oh=>h2o+c3h6+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
4753. c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c3h6+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
4754. c6h12o-AE+h=>h2+c2h4+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
4755. c6h12o-AE+oh=>h2o+c2h4+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
4756. c6h12o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
4757. hexanone+h=>h2+ch2co+pc4h9 2.70E+07 2.0 5000.0
4758. hexanone+oh=>h2o+ch2co+pc4h9 7.80E+06 2.0 -765.0
4759. hexanone+ho2=>h2o2+ch2co+pc4h9 1.20E+12 0.0 15500.0
4760. hexanone+ch3=>ch4+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 9600.0
4761. hexanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 9600.0
4762. hexanone+c2h5=>c2h6+ch2co+pc4h9 6.00E+11 0.0 11000.0
4763. Ac7h15+o2=c7h15qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
4764. Bc7h15+o2=c7h15qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
4765. Cc7h15+o2=c7h15qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
4766. Dc7h15+o2=c7h15qjD 1.80E+19 -2.5 0.0
4767. Ac7h15+ho2=c7h15ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4768. Bc7h15+ho2=c7h15ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4769. Cc7h15+ho2=c7h15ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4770. Dc7h15+ho2=c7h15ojD+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
4771. Ac7h15+ch3o2=c7h15ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4772. Bc7h15+ch3o2=c7h15ojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4773. Cc7h15+ch3o2=c7h15ojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4774. Dc7h15+ch3o2=c7h15ojD+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4775. Ac7h15+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4776. Bc7h15+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4777. Cc7h15+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4778. Dc7h15+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4779. Ac7h15+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4780. Bc7h15+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4781. Cc7h15+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4782. Dc7h15+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4783. Ac7h15+ic3h7o2=c7h15ojA+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4784. Bc7h15+ic3h7o2=c7h15ojB+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4785. Cc7h15+ic3h7o2=c7h15ojC+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4786. Dc7h15+ic3h7o2=c7h15ojD+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
4787. Ac7h15+c7h15qjA=2c7h15ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4788. Bc7h15+c7h15qjA=c7h15ojB+c7h15ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4789. Cc7h15+c7h15qjA=c7h15ojC+c7h15ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4790. Dc7h15+c7h15qjA=c7h15ojD+c7h15ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
4791. Ac7h15+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4792. Bc7h15+c7h15qjB=2c7h15ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4793. Cc7h15+c7h15qjB=c7h15ojC+c7h15ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4794. Dc7h15+c7h15qjB=c7h15ojD+c7h15ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
4795. Ac7h15+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4796. Bc7h15+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4797. Cc7h15+c7h15qjC=2c7h15ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4798. Dc7h15+c7h15qjC=c7h15ojD+c7h15ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
4799. Ac7h15+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
4800. Bc7h15+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
4801. Cc7h15+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
4802. Dc7h15+c7h15qjD=2c7h15ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
4803. c7h15ojA=ch2o+Ac6h13 4.72E+19 -1.9 14898.5
4804. c7h15ojB=ch3hco+Ac5h11 8.06E+09 1.2 9903.0
4805. c7h15ojB=ch3+c5h11hco 5.10E+11 0.6 15328.0
4806. c7h15ojC=ethco+pc4h9 1.81E+12 0.5 10510.0
4807. c7h15ojC=c2h5+nc4h9hco 1.53E+14 0.0 10260.0
4808. c7h15ojD=nc3h7+nc3h7hco 7.35E+15 -0.3 11711.0
4809. c7h15qA=oh+c7h15ojA 1.50E+16 0.0 42500.0
4810. c7h15qB=oh+c7h15ojB 1.25E+16 0.0 41600.0
4811. c7h15qC=oh+c7h15ojC 1.25E+16 0.0 41600.0
4812. c7h15qD=oh+c7h15ojD 1.25E+16 0.0 41600.0
4813. c7h15qjA=c7h14rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
4814. c7h15qjA=c7h14rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
4815. c7h15qjA=c7h14rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
4816. c7h15qjA=c7h14rEqA 2.90E+06 1.0 21000.0
4817. c7h15qjB=c7h14rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
4818. c7h15qjB=c7h14rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
4819. c7h15qjB=c7h14rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
4820. c7h15qjB=c7h14rEqB 1.70E+07 1.0 22000.0
4821. c7h15qjB=c7h14rFqB 2.90E+06 1.0 21000.0
4822. c7h15qjC=c7h14rAqC 1.48E+08 1.0 28000.0
4823. c7h15qjC=c7h14rBqC 5.70E+08 1.0 32500.0
4824. c7h15qjC=c7h14rDqC 5.70E+08 1.0 32500.0
4825. c7h15qjC=c7h14rEqC 9.90E+07 1.0 25000.0
4826. c7h15qjC=c7h14rFqC 1.70E+07 1.0 22000.0
4827. c7h15qjC=c7h14rGqC 2.55E+07 1.0 24000.0
4828. c7h15qjD=c7h14rAqD 5.06E+07 1.0 25000.0
4829. c7h15qjD=c7h14rBqD 1.98E+08 1.0 25000.0
4830. c7h15qjD=c7h14rCqD 1.14E+09 1.0 32500.0
4831. c7h15qjA+ho2=c7h15qA+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4832. c7h15qjD+ho2=c7h15qB+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4833. c7h15qjC+ho2=c7h15qC+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4834. c7h15qjB+ho2=c7h15qD+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
4835. c7h15qjA+ho2=c7h15ojA+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4836. c7h15qjD+ho2=c7h15ojB+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4837. c7h15qjC+ho2=c7h15ojC+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4838. c7h15qjB+ho2=c7h15ojD+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4839. c7h15qjA+ch3o2=c7h15ojA+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4840. c7h15qjD+ch3o2=c7h15ojB+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4841. c7h15qjC+ch3o2=c7h15ojC+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4842. c7h15qjB+ch3o2=c7h15ojD+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4843. c7h15qjA+c2h5o2=c7h15ojA+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4844. c7h15qjD+c2h5o2=c7h15ojB+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4845. c7h15qjC+c2h5o2=c7h15ojC+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4846. c7h15qjB+c2h5o2=c7h15ojD+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4847. c7h15qjA+nc3h7o2=c7h15ojA+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4848. c7h15qjD+nc3h7o2=c7h15ojB+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4849. c7h15qjC+nc3h7o2=c7h15ojC+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4850. c7h15qjB+nc3h7o2=c7h15ojD+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4851. c7h15qjA+c7h15qjA=c7h15ojA+c7h15ojA+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4852. c7h15qjA+c7h15qjB=c7h15ojA+c7h15ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4853. c7h15qjA+c7h15qjC=c7h15ojA+c7h15ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4854. c7h15qjA+c7h15qjD=c7h15ojA+c7h15ojD+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4855. c7h15qjB+c7h15qjB=c7h15ojB+c7h15ojB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4856. c7h15qjB+c7h15qjC=c7h15ojB+c7h15ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4857. c7h15qjB+c7h15qjD=c7h15ojB+c7h15ojD+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4858. c7h15qjC+c7h15qjC=c7h15ojC+c7h15ojC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4859. c7h15qjC+c7h15qjD=c7h15ojC+c7h15ojD+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4860. c7h15qjD+c7h15qjD=c7h15ojD+c7h15ojD+o2 1.00E+11 0.0 0.0
4861. c7h14rDqA=c5h10+c2h4o2h 2.00E+13 0.0 28700.0
4862. c7h14rEqA=c4h8+c3h6ooh1-3 2.00E+13 0.0 28700.0
4863. c7h14rEqB=c4h8+c3h6ooh2-1 2.00E+13 0.0 28700.0
4864. c7h14rFqB=c3h6+c4h8rDqB 2.00E+13 0.0 28700.0
4865. c7h14rFqC=c3h6+c4h8rAqB 2.00E+13 0.0 28700.0
4866. c7h14rGqC=c2h4+c5h10rAqC 2.00E+13 0.0 28700.0
4867. c7h14rAqD=c2h4+c5h10rAqB 2.00E+13 0.0 28700.0
4868. c7h14rBqA+o2=c7h14qjBqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4869. c7h14rCqA+o2=c7h14qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4870. c7h14rDqA+o2=c7h14qjDqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4871. c7h14rEqA+o2=c7h14qjEqA 1.80E+19 -2.5 0.0
4872. c7h14rAqB+o2=c7h14qjAqB 1.50E+18 -2.5 0.0
4873. c7h14rCqB+o2=c7h14qjCqB 1.05E+19 -2.5 0.0
4874. c7h14rDqB+o2=c7h14qjDqB 1.80E+19 -2.5 0.0
4875. c7h14rEqB+o2=c7h14qjEqB 1.80E+19 -2.5 0.0
4876. c7h14rFqB+o2=c7h14qjFqB 1.70E+19 -2.5 0.0
4877. c7h14rAqC+o2=c7h14qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
4878. c7h14rBqC+o2=c7h14qjBqC 9.50E+18 -2.5 0.0
4879. c7h14rDqC+o2=c7h14qjDqC 1.05E+19 -2.5 0.0
4880. c7h14rEqC+o2=c7h14qjEqC 1.80E+19 -2.5 0.0
4881. c7h14rFqC+o2=c7h14qjFqC 1.70E+19 -2.5 0.0
4882. c7h14rGqC+o2=c7h14qjGqC 9.00E+18 -2.5 0.0
4883. c7h14rAqD+o2=c7h14qjAqD 9.00E+18 -2.5 0.0
4884. c7h14rBqD+o2=c7h14qjBqD 1.70E+19 -2.5 0.0
4885. c7h14rCqD+o2=c7h14qjCqD 1.05E+19 -2.5 0.0
4886. c7h14rAqC=oh+c2h4+nc4h9hco 2.66E+04 3.0 24773.0
4887. c7h14rCqA=oh+ch2o+c6h12-1 1.47E+13 0.4 28543.0
4888. c7h14rBqD=oh+nc3h7hco+c3h6 4.72E+03 3.3 23974.0
4889. c7h14rDqB=oh+ch3hco+c5h10 1.42E+05 2.9 24777.0
4890. c7h14rEqC=oh+ethco+c4h8 3.96E+04 3.1 24093.0
4891. c7h14rBqA=oh+c7h14o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4892. c7h14rCqA=oh+c7h14o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4893. c7h14rDqA=oh+c7h14o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4894. c7h14rEqA=oh+c7h14o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
4895. c7h14rAqB=oh+c7h14o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
4896. c7h14rCqB=oh+c7h14o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4897. c7h14rDqB=oh+c7h14o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
4898. c7h14rEqB=oh+c7h14o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
4899. c7h14rFqB=oh+c7h14o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
4900. c7h14rBqC=oh+c7h14o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
4901. c7h14rAqC=oh+c7h14o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
4902. c7h14rDqC=oh+c7h14o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
4903. c7h14rEqC=oh+c7h14o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
4904. c7h14rFqC=oh+c7h14o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
4905. c7h14rGqC=oh+c7h14o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
4906. c7h14rCqD=oh+c7h14o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
4907. c7h14rBqD=oh+c7h14o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
4908. c7h14rAqD=oh+c7h14o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
4909. ho2+c7h14-1=c7h14rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
4910. ho2+c7h14-1=c7h14rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0
4911. ho2+c7h14-2=c7h14rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
4912. ho2+c7h14-2=c7h14rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
4913. ho2+c7h14-3=c7h14rCqD 1.50E+11 0.0 7800.0
4914. ho2+c7h14-3=c7h14rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
4915. c7h14qjBqA=>oh+c7h13oAqB 3.35E+09 1.0 33500.0
4916. c7h14qjCqA=>oh+c7h13oAqC 5.75E+08 1.0 26000.0
4917. c7h14qjDqA=>oh+c7h13oAqD 9.89E+07 1.0 23000.0
4918. c7h14qjEqA=>oh+c7h13oAqE 1.70E+07 1.0 22000.0
4919. c7h14qjAqB=>oh+c7h13oBqA 1.68E+09 1.0 30500.0
4920. c7h14qjCqB=>oh+c7h13oBqC 1.68E+09 1.0 30500.0
4921. c7h14qjDqB=>oh+c7h13oBqD 2.88E+08 1.0 23000.0
4922. c7h14qjEqB=>oh+c7h13oBqE 4.94E+07 1.0 20000.0
4923. c7h14qjFqB=>oh+c7h13oBqF 8.50E+06 1.0 19000.0
4924. c7h14qjAqC=>oh+c7h13oCqA 2.88E+08 1.0 23000.0
4925. c7h14qjBqC=>oh+c7h13oCqB 1.68E+09 1.0 30500.0
4926. c7h14qjDqC=>oh+c7h13oCqD 1.68E+09 1.0 30500.0
4927. c7h14qjEqC=>oh+c7h13oCqE 2.88E+08 1.0 23000.0
4928. c7h14qjFqC=>oh+c7h13oCqF 4.94E+07 1.0 20000.0
4929. c7h14qjGqC=>oh+c7h13oCqG 8.50E+06 1.0 19000.0
4930. c7h14qjAqD=>oh+c7h13oDqA 4.94E+07 1.0 20000.0
4931. c7h14qjBqD=>oh+c7h13oDqB 2.88E+08 1.0 23000.0
4932. c7h14qjCqD=>oh+c7h13oDqC 1.68E+09 1.0 30500.0
4933. c7h13oAqB=>oh+hco+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4934. c7h13oAqC=>oh+ch2hco+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4935. c7h13oAqD=>oh+nc3h7hco+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
4936. c7h13oAqE=>oh+ethco+c3h6cho-1 1.00E+16 0.0 43000.0
4937. c7h13oBqA=>oh+ch2o+c5h11co 1.00E+16 0.0 43000.0

4938.	c7h13oBqC=>oh+ch3co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4939.	c7h13oBqD=>oh+nc3h7hco+ch2coch3	1.00E+16	0.0	43000.0
4940.	c7h13oBqE=>oh+ch3coc2h4p+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
4941.	c7h13oBqF=>oh+ch3hco+c3h6coch3-1	1.00E+16	0.0	43000.0
4942.	c7h13oCqA=>oh+ch2o+nc4h9coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
4943.	c7h13oCqB=>oh+ch3hco+nc4h9co	1.00E+16	0.0	43000.0
4944.	c7h13oCqD=>oh+c2h5co+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
4945.	c7h13oCqE=>oh+c2h5coch2+ethco	1.00E+16	0.0	43000.0
4946.	c7h13oCqF=>oh+ch3hco+c2h5coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
4947.	c7h13oCqG=>oh+ch2o+c2h5coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
4948.	c7h13oDqA=>oh+ch2o+nc3h7coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
4949.	c7h13oDqB=>oh+ch3hco+nc3h7coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
4950.	c7h13oDqC=>oh+ethco+c3h7co	1.00E+16	0.0	43000.0
4951.	c7h14o-AB+h=>h2+acrol+pc4h9	4.80E+08	1.5	2785.0
4952.	c7h14o-AB+oh=>h2o+acrol+pc4h9	2.40E+06	2.0	-1192.0
4953.	c7h14o-AB+ho2=>h2o2+acrol+pc4h9	2.50E+04	2.5	11605.0
4954.	c7h14o-AB+h=>h2+nc5h11coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
4955.	c7h14o-AB+oh=>h2o+nc5h11coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
4956.	c7h14o-AB+ho2=>h2o2+nc5h11coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
4957.	c7h14o-BC+h=>h2+mvk+nc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
4958.	c7h14o-BC+oh=>h2o+mvk+nc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
4959.	c7h14o-BC+ho2=>h2o2+mvk+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
4960.	c7h14o-BC+h=>h2+ch3chco+pc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
4961.	c7h14o-BC+oh=>h2o+ch3chco+pc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
4962.	c7h14o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+pc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
4963.	c7h14o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+c2h5	2.40E+08	1.5	2005.0
4964.	c7h14o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+c2h5	1.20E+06	2.0	-1192.0
4965.	c7h14o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+c2h5	1.00E+04	2.5	9400.0
4966.	c7h14o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
4967.	c7h14o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
4968.	c7h14o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
4969.	c7h14o-AC+h=>h2+hco+c6h12-1	4.80E+08	1.5	2785.0
4970.	c7h14o-AC+oh=>h2o+hco+c6h12-1	2.40E+06	2.0	-1192.0
4971.	c7h14o-AC+ho2=>h2o2+hco+c6h12-1	2.50E+04	2.5	11605.0
4972.	c7h14o-AC+h=>h2+nc4h9coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
4973.	c7h14o-AC+oh=>h2o+nc4h9coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
4974.	c7h14o-AC+ho2=>h2o2+nc4h9coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
4975.	c7h14o-BD+h=>h2+c5h10+ch3co	2.40E+08	1.5	2005.0
4976.	c7h14o-BD+oh=>h2o+c5h10+ch3co	1.20E+06	2.0	-1192.0
4977.	c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c5h10+ch3co	1.00E+04	2.5	9400.0
4978.	c7h14o-BD+h=>h2+c3h6+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
4979.	c7h14o-BD+oh=>h2o+c3h6+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
4980.	c7h14o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
4981.	c7h14o-CE+h=>h2+c4h8+c2h5co	4.80E+08	1.5	2005.0
4982.	c7h14o-CE+oh=>h2o+c4h8+c2h5co	2.40E+06	2.0	-1192.0
4983.	c7h14o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
4984.	c7h14o-AD+h=>h2+ch2hco+c5h10	4.80E+08	1.5	2785.0
4985.	c7h14o-AD+oh=>h2o+ch2hco+c5h10	2.40E+13	0.0	5955.0
4986.	c7h14o-AD+ho2=>h2o2+ch2hco+c5h10	2.50E+04	2.5	11605.0
4987.	c7h14o-AD+h=>h2+nc3h7coc3h6-1	2.40E+08	1.5	2005.0
4988.	c7h14o-AD+oh=>h2o+nc3h7coc3h6-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
4989.	c7h14o-AD+ho2=>h2o2+nc3h7coc3h6-1	1.00E+04	2.5	9400.0
4990.	c7h14o-BE+h=>h2+c4h8+ch2coch3	2.40E+08	1.5	2005.0
4991.	c7h14o-BE+oh=>h2o+c4h8+ch2coch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
4992.	c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c4h8+ch2coch3	1.00E+04	2.5	9400.0
4993.	c7h14o-BE+h=>h2+c3h6+c2h5coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
4994.	c7h14o-BE+oh=>h2o+c3h6+c2h5coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
4995.	c7h14o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+c2h5coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
4996.	c7h14o-AE+h=>h2+ch2ch2hco+c4h8	4.80E+08	1.5	2785.0
4997.	c7h14o-AE+oh=>h2o+ch2ch2hco+c4h8	2.40E+06	2.0	-1192.0
4998.	c7h14o-AE+ho2=>h2o2+ch2ch2hco+c4h8	2.50E+04	2.5	11605.0
4999.	c7h14o-AE+h=>h2+c2h4+c2h5coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
5000.	c7h14o-AE+oh=>h2o+c2h4+c2h5coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
5001.	c7h14o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+c2h5coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
5002.	c7h14o-BF+h=>h2+c2h4+c3h6coch3-1	4.80E+08	1.5	2005.0
5003.	c7h14o-BF+oh=>h2o+c2h4+c3h6coch3-1	2.40E+06	2.0	-1192.0
5004.	c7h14o-BF+ho2=>h2o2+c2h4+c3h6coch3-1	1.00E+04	2.5	9400.0
5005.	c7h14-1+ho2=oh+c7h14o-AB	1.00E+12	0.0	14400.0
5006.	c7h14-2+ho2=oh+c7h14o-BC	1.00E+12	0.0	14400.0
5007.	c7h14-3+ho2=oh+c7h14o-CD	1.00E+12	0.0	14400.0
5008.	heptanone+h=>h2+ch2co+ch3+2c2h4	2.70E+07	2.0	5000.0
5009.	heptanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+2c2h4	7.80E+06	2.0	-765.0
5010.	heptanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+2c2h4	1.20E+12	0.0	15500.0
5011.	heptanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
5012.	heptanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	9600.0
5013.	heptanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+2c2h4	6.00E+11	0.0	11000.0
5014.	c6h11hco=Fc6h11-1+hco	7.25E+16	0.0	82400.0
5015.	c6h11hco+o2=c6h11co+ho2	2.00E+13	0.5	42200.0
5016.	c6h11hco+ho2=c6h11co+h2o2	1.70E+12	0.0	10700.0
5017.	c6h11hco+oh=c6h11co+h2o	2.35E+10	0.7	-1113.0
5018.	c6h11hco+o=c6h11co+oh	5.85E+12	0.0	1808.0
5019.	c6h11hco+h=c6h11co+h2	5.54E+02	3.5	5167.0
5020.	c6h11hco+ch3=c6h11co+ch4	2.25E+00	4.0	8285.0
5021.	c6h11hco+c2h5=c6h11co+c2h6	1.64E+00	3.6	9141.0
5022.	c6h11hco+hco=c6h11co+ch2o	4.70E+04	2.7	18235.0
5023.	c6h11hco+c2h3=c6h11co+c2h4	8.50E+09	0.0	6000.0
5024.	c6h11co=Fc6h11-1+co	2.00E+13	0.0	28700.0
5025.	Ac8h17+o2=c8h17qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
5026.	Bc8h17+o2=c8h17qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
5027.	Cc8h17+o2=c8h17qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
5028.	Dc8h17+o2=c8h17qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
5029.	Ac8h17+ho2=c8h17ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5030.	Bc8h17+ho2=c8h17ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5031.	Cc8h17+ho2=c8h17ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5032.	Dc8h17+ho2=c8h17ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5033.	Ac8h17+ch3o2=c8h17ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5034.	Bc8h17+ch3o2=c8h17ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5035.	Cc8h17+ch3o2=c8h17ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5036.	Dc8h17+ch3o2=c8h17ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5037.	Ac8h17+c2h5o2=c8h17ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5038.	Bc8h17+c2h5o2=c8h17ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5039.	Cc8h17+c2h5o2=c8h17ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5040.	Dc8h17+c2h5o2=c8h17ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5041.	Ac8h17+nc3h7o2=c8h17ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5042.	Bc8h17+nc3h7o2=c8h17ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5043.	Cc8h17+nc3h7o2=c8h17ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5044.	Dc8h17+nc3h7o2=c8h17ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5045.	Ac8h17+ic3h7o2=c8h17ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5046.	Bc8h17+ic3h7o2=c8h17ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5047.	Cc8h17+ic3h7o2=c8h17ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5048.	Dc8h17+ic3h7o2=c8h17ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5049.	Ac8h17+c8h17qjA=2c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5050.	Bc8h17+c8h17qjA=c8h17ojB+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5051.	Cc8h17+c8h17qjA=c8h17ojC+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5052.	Dc8h17+c8h17qjA=c8h17ojD+c8h17ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5053.	Ac8h17+c8h17qjB=c8h17ojA+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5054.	Bc8h17+c8h17qjB=2c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5055.	Cc8h17+c8h17qjB=c8h17ojC+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5056.	Dc8h17+c8h17qjB=c8h17ojD+c8h17ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5057.	Ac8h17+c8h17qjC=c8h17ojA+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5058.	Bc8h17+c8h17qjC=c8h17ojB+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5059.	Cc8h17+c8h17qjC=2c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5060.	Dc8h17+c8h17qjC=c8h17ojD+c8h17ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5061.	Ac8h17+c8h17qjD=c8h17ojA+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5062.	Bc8h17+c8h17qjD=c8h17ojB+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5063.	Cc8h17+c8h17qjD=c8h17ojC+c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5064.	Dc8h17+c8h17qjD=2c8h17ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5065.	c8h17ojA=ch2o+Ac7h15	1.15E+19	-1.7	14691.0
5066.	c8h17ojB=ch3hco+Ac6h13	6.40E+18	-1.5	13021.0
5067.	c8h17ojB=ch3+c6h13hco	9.01E+16	-1.0	16533.0
5068.	c8h17ojC=ethco+Ac5h11	6.65E+18	-1.5	12880.0
5069.	c8h17ojC=c2h5+c5h11hco	7.61E+20	-2.1	12641.0
5070.	c8h17ojD=nc3h7+nc4h9hco	4.52E+19	-1.7	13356.0
5071.	c8h17ojD=nc3h7hco+pc4h9	1.94E+20	-1.8	13104.0
5072.	c8h17qA=oh+c8h17ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
5073.	c8h17qB=oh+c8h17ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
5074.	c8h17qC=oh+c8h17ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
5075.	c8h17qD=oh+c8h17ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
5076.	c8h17qjA=c8h16rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
5077.	c8h17qjA=c8h16rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
5078.	c8h17qjA=c8h16rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
5079.	c8h17qjA=c8h16rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
5080.	c8h17qjB=c8h16rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
5081.	c8h17qjB=c8h16rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
5082.	c8h17qjB=c8h16rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
5083.	c8h17qjB=c8h16rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
5084.	c8h17qjB=c8h16rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
5085.	c8h17qjC=c8h16rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
5086.	c8h17qjC=c8h16rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
5087.	c8h17qjC=c8h16rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
5088.	c8h17qjC=c8h16rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
5089.	c8h17qjC=c8h16rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
5090.	c8h17qjC=c8h16rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
5091.	c8h17qjD=c8h16rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
5092.	c8h17qjD=c8h16rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
5093.	c8h17qjD=c8h16rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
5094.	c8h17qjD=c8h16rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
5095.	c8h17qjD=c8h16rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
5096.	c8h17qjD=c8h16rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
5097.	c8h17qjD=c8h16rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
5098.	c8h17qjA+ho2=c8h17qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5099.	c8h17qjB+ho2=c8h17qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5100.	c8h17qjC+ho2=c8h17qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5101.	c8h17qjD+ho2=c8h17qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5102.	c8h17qjA+h2o2=c8h17qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5103.	c8h17qjB+h2o2=c8h17qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5104.	c8h17qjC+h2o2=c8h17qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5105.	c8h17qjD+h2o2=c8h17qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5106.	c8h17qjA+ho2=c8h17ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5107.	c8h17qjB+ho2=c8h17ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5108.	c8h17qjC+ho2=c8h17ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5109.	c8h17qjD+ho2=c8h17ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5110.	c8h17qjA+ch3o2=c8h17ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5111.	c8h17qjB+ch3o2=c8h17ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5112.	c8h17qjC+ch3o2=c8h17ojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5113.	c8h17qjD+ch3o2=c8h17ojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5114.	c8h17qjA+c8h17qjA=c8h17ojA+c8h17ojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5115.	c8h17qjA+c8h17qjB=c8h17ojA+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5116.	c8h17qjA+c8h17qjC=c8h17ojA+c8h17ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5117.	c8h17qjA+c8h17qjD=c8h17ojA+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5118.	c8h17qjB+c8h17qjB=c8h17ojB+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5119.	c8h17qjB+c8h17qjC=c8h17ojC+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5120.	c8h17qjB+c8h17qjD=c8h17ojD+c8h17ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5121.	c8h17qjC+c8h17qjC=c8h17ojC+c8h17ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5122.	c8h17qjC+c8h17qjD=c8h17ojC+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5123.	c8h17qjD+c8h17qjD=c8h17ojD+c8h17ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5124.	c8h16rBqA+o2=c8h16qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
5125.	c8h16rCqA+o2=c8h16qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5126.	c8h16rDqA+o2=c8h16qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5127.	c8h16rEqA+o2=c8h16qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5128.	c8h16rAqB+o2=c8h16qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
5129.	c8h16rCqB+o2=c8h16qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5130.	c8h16rDqB+o2=c8h16qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5131.	c8h16rEqB+o2=c8h16qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5132.	c8h16rFqB+o2=c8h16qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5133.	c8h16rAqC+o2=c8h16qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
5134.	c8h16rBqC+o2=c8h16qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
5135.	c8h16rDqC+o2=c8h16qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5136.	c8h16rEqC+o2=c8h16qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5137.	c8h16rFqC+o2=c8h16qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5138.	c8h16rGqC+o2=c8h16qjGqC	1.70E+19	-2.5	0.0
5139.	c8h16rAqD+o2=c8h16qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
5140.	c8h16rBqD+o2=c8h16qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
5141.	c8h16rCqD+o2=c8h16qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5142.	c8h16rEqD+o2=c8h16qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5143.	c8h16rFqD+o2=c8h16qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5144.	c8h16rGqD+o2=c8h16qjGqD	1.70E+19	-2.5	0.0
5145.	c8h16rHqD+o2=c8h16qjHqD	9.00E+18	-2.5	0.0
5146.	c8h16rAqC=>oh+c2h4+c5h11hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5147.	c8h16rCqA=>oh+ch2o+c7h14-1	5.00E+13	0.0	25500.0
5148.	c8h16rBqD=>oh+c3h6+nc4h9hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5149.	c8h16rDqB=>oh+c6h12-1+ch3hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5150.	c8h16rFqD=>oh+c4h8+nc3h7hco	5.00E+13	0.0	25500.0
5151.	c8h16rEqC=>oh+ethco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
5152.	c8h16rBqA=oh+c8h16o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
5153.	c8h16rCqA=oh+c8h16o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
5154.	c8h16rDqA=oh+c8h16o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
5155.	c8h16rEqA=oh+c8h16o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
5156.	c8h16rAqB=oh+c8h16o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
5157.	c8h16rCqB=oh+c8h16o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
5158.	c8h16rDqB=oh+c8h16o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
5159.	c8h16rEqB=oh+c8h16o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
5160.	c8h16rFqB=oh+c8h16o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
5161.	c8h16rBqC=oh+c8h16o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
5162.	c8h16rAqC=oh+c8h16o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
5163.	c8h16rDqC=oh+c8h16o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
5164.	c8h16rEqC=oh+c8h16o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
5165.	c8h16rFqC=oh+c8h16o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
5166.	c8h16rGqC=oh+c8h16o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
5167.	c8h16rCqD=oh+c8h16o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
5168.	c8h16rBqD=oh+c8h16o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
5169.	c8h16rAqD=oh+c8h16o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
5170.	c8h16rEqD=oh+c8h16o-DE	1.38E+12	0.0	15900.0
5171.	c8h16rFqD=oh+c8h16o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
5172.	c8h16rGqD=oh+c8h16o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
5173.	c8h16rHqD=oh+c8h16o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
5174.	ho2+c8h16-1=c8h16rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
5175.	ho2+c8h16-1=c8h16rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
5176.	ho2+c8h16-2=c8h16rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
5177.	ho2+c8h16-2=c8h16rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
5178.	ho2+c8h16-3=c8h16rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
5179.	ho2+c8h16-3=c8h16rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
5180.	ho2+c8h16-4=c8h16rEqD	1.50E+11	0.0	7800.0
5181.	c8h16qjBqA=oh+c8h15oAqB	3.35E+09	1.0	30500.0

5182. c8h16qjCqA=oh+c8h15oAqC 5.75E+08 1.0 23000.0
5183. c8h16qjDqA=oh+c8h15oAqD 9.89E+07 1.0 20000.0
5184. c8h16qjEqA=oh+c8h15oAqE 1.70E+07 1.0 19000.0
5185. c8h16qjAqB=oh+c8h15oBqA 1.68E+09 1.0 27500.0
5186. c8h16qjCqB=oh+c8h15oBqC 1.68E+09 1.0 27500.0
5187. c8h16qjDqB=oh+c8h15oBqD 2.88E+08 1.0 20000.0
5188. c8h16qjEqB=oh+c8h15oBqE 4.94E+07 1.0 19000.0
5189. c8h16qjFqB=oh+c8h15oBqF 8.50E+06 1.0 16000.0
5190. c8h16qjAqC=oh+c8h15oCqA 2.88E+08 1.0 20000.0
5191. c8h16qjBqC=oh+c8h15oCqB 1.68E+09 1.0 27500.0
5192. c8h16qjDqC=oh+c8h15oCqD 1.68E+09 1.0 27500.0
5193. c8h16qjEqC=oh+c8h15oCqE 2.88E+08 1.0 20000.0
5194. c8h16qjFqC=oh+c8h15oCqF 4.94E+07 1.0 19000.0
5195. c8h16qjGqC=oh+c8h15oCqG 8.50E+06 1.0 16000.0
5196. c8h16qjAqD=oh+c8h15oDqA 4.94E+07 1.0 19000.0
5197. c8h16qjBqD=oh+c8h15oDqB 2.88E+08 1.0 20000.0
5198. c8h16qjCqD=oh+c8h15oDqC 1.68E+09 1.0 27500.0
5199. c8h16qjEqD=oh+c8h15oDqE 1.68E+09 1.0 27500.0
5200. c8h16qjFqD=oh+c8h15oDqF 2.88E+08 1.0 20000.0
5201. c8h16qjGqD=oh+c8h15oDqG 4.94E+07 1.0 19000.0
5202. c8h16qjHqD=oh+c8h15oDqH 8.50E+06 1.0 16000.0
5203. c8h15oAqB=>oh+hco+c6h13hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5204. c8h15oAqC=>oh+ch2hco+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5205. c8h15oAqD=>oh+ch2ch2hco+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5206. c8h15oAqE=>oh+c3h6cho-1+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5207. c8h15oBqA=>oh+ch2o+c6h13co 1.00E+16 0.0 43000.0
5208. c8h15oBqC=>oh+ch3co+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5209. c8h15oBqD=>oh+ch2coch3+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5210. c8h15oBqE=>oh+ch3coc2h4p+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5211. c8h15oBqF=>oh+c3h6coch3-1+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
5212. c8h15oCqA=>oh+ch2o+nc5h11coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
5213. c8h15oCqB=>oh+ch3hco+c5h11co 1.00E+16 0.0 43000.0
5214. c8h15oCqD=>oh+c2h5co+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5215. c8h15oCqE=>oh+c2h5coch2+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5216. c8h15oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
5217. c8h15oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5218. c8h15oDqA=>oh+ch2o+nc4h9coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
5219. c8h15oDqB=>oh+ch3hco+nc4h9coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
5220. c8h15oDqC=>oh+ethco+nc4h9co 1.00E+16 0.0 43000.0
5221. c8h15oDqE=>oh+nc3h7hco+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
5222. c8h15oDqF=>oh+nc3h7coch2+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
5223. c8h15oDqG=>oh+nc3h7coc2h4p+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5224. c8h15oDqH=>oh+nc3h7coc3h6-1+ch2o 1.00E+16 0.0 43000.0
5225. c8h16o-AB+h=>h2+acrol+Ac5h11 4.80E+08 1.5 2785.0
5226. c8h16o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac5h11 2.40E+06 2.0 -1192.0
5227. c8h16o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac5h11 2.50E+04 2.5 11605.0
5228. c8h16o-AB+h=>h2+ch2co+Ac6h13 2.40E+08 1.5 2005.0
5229. c8h16o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac6h13 1.20E+06 2.0 -1192.0
5230. c8h16o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac6h13 1.00E+04 2.5 9400.0
5231. c8h16o-BC+h=>h2+mvk+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
5232. c8h16o-BC+oh=>h2o+mvk+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
5233. c8h16o-BC+ho2=>h2o2+mvk+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
5234. c8h16o-BC+h=>h2+c2h5coc2h3+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
5235. c8h16o-BC+oh=>h2o+c2h5coc2h3+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
5236. c8h16o-BC+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
5237. c8h16o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
5238. c8h16o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
5239. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
5240. c8h16o-CD+h=>h2+nc3h7+c2h5coc2h3 2.40E+08 1.5 2005.0
5241. c8h16o-CD+oh=>h2o+nc3h7+c2h5coc2h3 1.20E+06 2.0 -1192.0
5242. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+nc3h7+c2h5coc2h3 1.00E+04 2.5 9400.0

5243. c8h16o-CD+h=>h2+c2h5+c2h3coc3h7 4.80E+08 1.5 2005.0
5244. c8h16o-CD+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc3h7 2.40E+06 2.0 -1192.0
5245. c8h16o-CD+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc3h7 2.00E+04 2.5 9400.0
5246. c8h16o-AC+h=>h2+c7h14-1+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
5247. c8h16o-AC+oh=>h2o+c7h14-1+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
5248. c8h16o-AC+ho2=>h2o2+c7h14-1+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
5249. c8h16o-AC+h=>h2+c2h4+c5h11co 2.40E+08 1.5 2005.0
5250. c8h16o-AC+oh=>h2o+c2h4+c5h11co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5251. c8h16o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c5h11co 1.00E+04 2.5 9400.0
5252. c8h16o-BD+h=>h2+ch3co+c6h12-1 2.40E+08 1.5 2005.0
5253. c8h16o-BD+oh=>h2o+ch3co+c6h12-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
5254. c8h16o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c6h12-1 1.00E+04 2.5 9400.0
5255. c8h16o-BD+h=>h2+c3h6+nc4h9co 2.40E+08 1.5 2005.0
5256. c8h16o-BD+oh=>h2o+c3h6+nc4h9co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5257. c8h16o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9co 1.00E+04 2.5 9400.0
5258. c8h16o-CE+h=>h2+c5h10+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
5259. c8h16o-CE+oh=>h2o+c5h10+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5260. c8h16o-CE+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
5261. c8h16o-CE+h=>h2+c4h8+c3h7co 2.40E+08 1.5 2005.0
5262. c8h16o-CE+oh=>h2o+c4h8+c3h7co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5263. c8h16o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c3h7co 1.00E+04 2.5 9400.0
5264. c8h16o-AD+h=h2+c6h12-1+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
5265. c8h16o-AD+oh=h2o+c6h12-1+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
5266. c8h16o-AD+ho2=h2o2+c6h12-1+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
5267. c8h16o-AD+h=h2+c2h4+nc4h9coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
5268. c8h16o-AD+oh=h2o+c2h4+nc4h9coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
5269. c8h16o-AD+ho2=h2o2+c2h4+nc4h9coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
5270. c8h16o-BE+h=h2+c5h10+ch2coch3 2.40E+08 1.5 2005.0
5271. c8h16o-BE+oh=h2o+c5h10+ch2coch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
5272. c8h16o-BE+ho2=h2o2+c5h10+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
5273. c8h16o-BE+h=h2+c3h6+nc3h7coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
5274. c8h16o-BE+oh=h2o+c3h6+nc3h7coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
5275. c8h16o-BE+ho2=h2o2+c3h6+nc3h7coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
5276. c8h16o-CF+h=h2+c4h8+c2h5coch2 4.80E+08 1.5 2005.0
5277. c8h16o-CF+oh=h2o+c4h8+c2h5coch2 2.40E+06 2.0 -1192.0
5278. c8h16o-CF+ho2=h2o2+c4h8+c2h5coch2 2.00E+04 2.5 9400.0
5279. c8h16o-AE+h=h2+c5h10+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
5280. c8h16o-AE+oh=h2o+c5h10+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
5281. c8h16o-AE+ho2=h2o2+c5h10+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
5282. c8h16o-AE+h=h2+c2h4+nc3h7coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5283. c8h16o-AE+oh=h2o+c2h4+nc3h7coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5284. c8h16o-AE+ho2=h2o2+c2h4+nc3h7coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5285. c8h16o-BF+h=h2+c4h8+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5286. c8h16o-BF+oh=h2o+c4h8+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5287. c8h16o-BF+ho2=h2o2+c4h8+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5288. c8h16o-BF+h=h2+c3h6+c2h5coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5289. c8h16o-BF+oh=h2o+c3h6+c2h5coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5290. c8h16o-BF+ho2=h2o2+c3h6+c2h5coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5291. octanone+h=h2+ch2co+c2h5+2c2h4 2.70E+07 2.0 5000.0
5292. octanone+oh=h2o+ch2co+c2h5+2c2h4 7.80E+06 2.0 -765.0
5293. octanone+ho2=h2o2+ch2co+c2h5+2c2h4 1.20E+12 0.0 15500.0
5294. octanone+ch3=>ch4+ch2co+c2h5+2c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
5295. octanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+c2h5+2c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
5296. octanone+c2h5=>c2h6+ch2co+c2h5+2c2h4 6.00E+11 0.0 11000.0
5297. Ac9h19+o2=c9h19qjA 9.00E+18 -2.5 0.0
5298. Bc9h19+o2=c9h19qjB 1.70E+19 -2.5 0.0
5299. Cc9h19+o2=c9h19qjC 1.80E+19 -2.5 0.0
5300. Dc9h19+o2=c9h19qjD 1.80E+19 -2.5 0.0
5301. Ec9h19+o2=c9h19qjE 1.80E+19 -2.5 0.0
5302. Ac9h19+ho2=c9h19ojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
5303. Bc9h19+ho2=c9h19ojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0

5304. Cc9h19+ho2=c9h19ojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
5305. Dc9h19+ho2=c9h19ojD+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
5306. Ec9h19+ho2=c9h19ojE+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
5307. Ac9h19+ch3o2=c9h19ojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5308. Bc9h19+ch3o2=c9h19ojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5309. Cc9h19+ch3o2=c9h19ojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5310. Dc9h19+ch3o2=c9h19ojD+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5311. Ec9h19+ch3o2=c9h19ojE+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5312. Ac9h19+c2h5o2=c9h19ojA+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5313. Bc9h19+c2h5o2=c9h19ojB+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5314. Cc9h19+c2h5o2=c9h19ojC+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5315. Dc9h19+c2h5o2=c9h19ojD+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5316. Ec9h19+c2h5o2=c9h19ojE+c2h5o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5317. Ac9h19+nc3h7o2=c9h19ojA+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5318. Bc9h19+nc3h7o2=c9h19ojB+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5319. Cc9h19+nc3h7o2=c9h19ojC+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5320. Dc9h19+nc3h7o2=c9h19ojD+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5321. Ec9h19+nc3h7o2=c9h19ojE+nc3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5322. Ac9h19+ic3h7o2=c9h19ojA+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5323. Bc9h19+ic3h7o2=c9h19ojB+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5324. Cc9h19+ic3h7o2=c9h19ojC+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5325. Dc9h19+ic3h7o2=c9h19ojD+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5326. Ec9h19+ic3h7o2=c9h19ojE+ic3h7o 7.00E+12 0.0 -1000.0
5327. Ac9h19+c9h19qjA=2c9h19ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
5328. Bc9h19+c9h19qjA=c9h19ojB+c9h19ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
5329. Cc9h19+c9h19qjA=c9h19ojC+c9h19ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
5330. Dc9h19+c9h19qjA=c9h19ojD+c9h19ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
5331. Ec9h19+c9h19qjA=c9h19ojE+c9h19ojA 7.00E+12 0.0 -1000.0
5332. Ac9h19+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
5333. Bc9h19+c9h19qjB=2c9h19ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
5334. Cc9h19+c9h19qjB=c9h19ojC+c9h19ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
5335. Dc9h19+c9h19qjB=c9h19ojD+c9h19ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
5336. Ec9h19+c9h19qjB=c9h19ojE+c9h19ojB 7.00E+12 0.0 -1000.0
5337. Ac9h19+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
5338. Bc9h19+c9h19qjC=c9h19ojB+c9h19ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
5339. Cc9h19+c9h19qjC=2c9h19ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
5340. Dc9h19+c9h19qjC=c9h19ojD+c9h19ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
5341. Ec9h19+c9h19qjC=c9h19ojE+c9h19ojC 7.00E+12 0.0 -1000.0
5342. Ac9h19+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
5343. Bc9h19+c9h19qjD=c9h19ojB+c9h19ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
5344. Cc9h19+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
5345. Dc9h19+c9h19qjD=2c9h19ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
5346. Ec9h19+c9h19qjD=c9h19ojE+c9h19ojD 7.00E+12 0.0 -1000.0
5347. Ac9h19+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE 7.00E+12 0.0 -1000.0
5348. Bc9h19+c9h19qjE=c9h19ojB+c9h19ojE 7.00E+12 0.0 -1000.0
5349. Cc9h19+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE 7.00E+12 0.0 -1000.0
5350. Dc9h19+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE 7.00E+12 0.0 -1000.0
5351. Ec9h19+c9h19qjE=2c9h19ojE 7.00E+12 0.0 -1000.0
5352. c9h19ojA=ch2o+Ac8h17 1.22E+19 -1.7 14690.0
5353. c9h19ojB=ch3hco+Ac7h15 6.40E+10 0.9 10202.0
5354. c9h19ojB=ch3+c7h15hco 2.08E+10 1.1 14206.0
5355. c9h19ojC=ethco+Ac6h13 1.08E+11 0.9 10094.0
5356. c9h19ojC=c2h5+c6h13hco 1.64E+13 0.3 9297.0
5357. c9h19ojD=nc3h7+c5h11hco 1.51E+14 -0.1 11001.0
5358. c9h19ojD=nc3h7hco+Ac5h11 3.96E+14 -0.1 11590.0
5359. c9h19ojE=pc4h9+nc4h9hco 4.97E+14 -0.1 11232.0
5360. c9h19qA=oh+c9h19ojA 1.50E+16 0.0 42500.0
5361. c9h19qB=oh+c9h19ojB 1.25E+16 0.0 41600.0
5362. c9h19qC=oh+c9h19ojC 1.25E+16 0.0 41600.0
5363. c9h19qD=oh+c9h19ojD 1.25E+16 0.0 41600.0
5364. c9h19qE=oh+c9h19ojE 1.25E+16 0.0 41600.0

5365. c9h19qjA=c9h18rBqA 5.70E+08 1.0 32500.0
5366. c9h19qjA=c9h18rCqA 9.90E+07 1.0 25000.0
5367. c9h19qjA=c9h18rDqA 1.70E+07 1.0 22000.0
5368. c9h19qjA=c9h18rEqA 2.90E+06 1.0 21000.0
5369. c9h19qjB=c9h18rAqB 8.65E+08 1.0 35500.0
5370. c9h19qjB=c9h18rCqB 5.70E+08 1.0 32500.0
5371. c9h19qjB=c9h18rDqB 9.90E+07 1.0 25000.0
5372. c9h19qjB=c9h18rEqB 1.70E+07 1.0 22000.0
5373. c9h19qjB=c9h18rFqB 2.90E+06 1.0 21000.0
5374. c9h19qjC=c9h18rAqC 1.48E+08 1.0 28000.0
5375. c9h19qjC=c9h18rBqC 5.70E+08 1.0 32500.0
5376. c9h19qjC=c9h18rDqC 5.70E+08 1.0 32500.0
5377. c9h19qjC=c9h18rEqC 9.90E+07 1.0 25000.0
5378. c9h19qjC=c9h18rFqC 1.70E+07 1.0 22000.0
5379. c9h19qjC=c9h18rGqC 2.90E+06 1.0 21000.0
5380. c9h19qjD=c9h18rAqD 2.53E+07 1.0 25000.0
5381. c9h19qjD=c9h18rBqD 9.90E+07 1.0 25000.0
5382. c9h19qjD=c9h18rCqD 5.70E+08 1.0 32500.0
5383. c9h19qjD=c9h18rEqD 5.70E+08 1.0 32500.0
5384. c9h19qjD=c9h18rFqD 9.90E+07 1.0 25000.0
5385. c9h19qjD=c9h18rGqD 1.70E+07 1.0 22000.0
5386. c9h19qjD=c9h18rHqD 2.90E+06 1.0 21000.0
5387. c9h19qjE=c9h18rAqE 8.70E+06 1.0 24000.0
5388. c9h19qjE=c9h18rBqE 3.40E+07 1.0 22000.0
5389. c9h19qjE=c9h18rCqE 1.98E+08 1.0 25000.0
5390. c9h19qjE=c9h18rDqE 1.14E+09 1.0 32500.0
5391. c9h19qjA+ho2=c9h19qA+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
5392. c9h19qjD+ho2=c9h19qB+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
5393. c9h19qjE+ho2=c9h19qC+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
5394. c9h19qjC+ho2=c9h19qD+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
5395. c9h19qjB+ho2=c9h19qE+o2 2.90E+11 0.0 1550.0
5396. c9h19qjA+h2o2=c9h19qA+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
5397. c9h19qjB+h2o2=c9h19qB+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
5398. c9h19qjC+h2o2=c9h19qC+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
5399. c9h19qjD+h2o2=c9h19qD+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
5400. c9h19qjE+h2o2=c9h19qE+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
5401. c9h19qjA+ho2=c9h19ojA+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
5402. c9h19qjB+ho2=c9h19ojB+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
5403. c9h19qjC+ho2=c9h19ojC+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
5404. c9h19qjD+ho2=c9h19ojD+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
5405. c9h19qjE+ho2=c9h19ojE+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
5406. c9h19qjA+ch3o2=c9h19ojA+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5407. c9h19qjB+ch3o2=c9h19ojB+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5408. c9h19qjC+ch3o2=c9h19ojC+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5409. c9h19qjD+ch3o2=c9h19ojD+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5410. c9h19qjE+ch3o2=c9h19ojE+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5411. c9h19qjA+c9h19qjA=c9h19ojA+c9h19ojA+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5412. c9h19qjA+c9h19qjB=c9h19ojA+c9h19ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5413. c9h19qjA+c9h19qjC=c9h19ojA+c9h19ojC+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5414. c9h19qjA+c9h19qjD=c9h19ojA+c9h19ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5415. c9h19qjA+c9h19qjE=c9h19ojA+c9h19ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5416. c9h19qjB+c9h19qjB=c9h19ojB+c9h19ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5417. c9h19qjB+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5418. c9h19qjB+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5419. c9h19qjB+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5420. c9h19qjC+c9h19qjC=c9h19ojC+c9h19ojC+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5421. c9h19qjC+c9h19qjD=c9h19ojC+c9h19ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5422. c9h19qjC+c9h19qjE=c9h19ojC+c9h19ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5423. c9h19qjD+c9h19qjD=c9h19ojD+c9h19ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5424. c9h19qjD+c9h19qjE=c9h19ojD+c9h19ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
5425. c9h19qjE+c9h19qjE=c9h19ojE+c9h19ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0

5426. c9h18rBqA+o2=c9h18qjBqA 1.70E+19 -2.5 0.0
5427. c9h18rCqA+o2=c9h18qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
5428. c9h18rDqA+o2=c9h18qjDqA 1.80E+19 -2.5 0.0
5429. c9h18rEqA+o2=c9h18qjEqA 1.80E+19 -2.5 0.0
5430. c9h18rAqB+o2=c9h18qjAqB 9.00E+18 -2.5 0.0
5431. c9h18rCqB+o2=c9h18qjCqB 1.80E+19 -2.5 0.0
5432. c9h18rDqB+o2=c9h18qjDqB 1.80E+19 -2.5 0.0
5433. c9h18rEqB+o2=c9h18qjEqB 1.80E+19 -2.5 0.0
5434. c9h18rFqB+o2=c9h18qjFqB 1.80E+19 -2.5 0.0
5435. c9h18rAqC+o2=c9h18qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
5436. c9h18rBqC+o2=c9h18qjBqC 1.70E+19 -2.5 0.0
5437. c9h18rDqC+o2=c9h18qjDqC 1.80E+19 -2.5 0.0
5438. c9h18rEqC+o2=c9h18qjEqC 1.80E+19 -2.5 0.0
5439. c9h18rFqC+o2=c9h18qjFqC 1.80E+19 -2.5 0.0
5440. c9h18rGqC+o2=c9h18qjGqC 1.80E+19 -2.5 0.0
5441. c9h18rAqD+o2=c9h18qjAqD 9.00E+18 -2.5 0.0
5442. c9h18rBqD+o2=c9h18qjBqD 1.70E+19 -2.5 0.0
5443. c9h18rCqD+o2=c9h18qjCqD 1.80E+19 -2.5 0.0
5444. c9h18rEqD+o2=c9h18qjEqD 1.80E+19 -2.5 0.0
5445. c9h18rFqD+o2=c9h18qjFqD 1.80E+19 -2.5 0.0
5446. c9h18rGqD+o2=c9h18qjGqD 1.80E+19 -2.5 0.0
5447. c9h18rHqD+o2=c9h18qjHqD 1.70E+19 -2.5 0.0
5448. c9h18rAqE+o2=c9h18qjAqE 9.00E+18 -2.5 0.0
5449. c9h18rBqE+o2=c9h18qjBqE 1.70E+19 -2.5 0.0
5450. c9h18rCqE+o2=c9h18qjCqE 1.80E+19 -2.5 0.0
5451. c9h18rDqE+o2=c9h18qjDqE 1.80E+19 -2.5 0.0
5452. c9h18rCqA=oh+ch2o+c8h16-1 1.68E+15 -0.2 29180.0
5453. c9h18rDqB=oh+ch3hco+c7h14-1 3.09E+17 -0.9 29019.0
5454. c9h18rAqC=oh+c2h4+c6h13hco 4.01E+15 -0.4 28648.0
5455. c9h18rEqC=oh+ethco+c6h12-1 1.09E+17 -0.8 28379.0
5456. c9h18rBqD=oh+c3h6+c5h11hco 5.96E+14 -0.1 27833.0
5457. c9h18rFqD=oh+c5h10+nc3h7hco 3.11E+16 -0.6 28187.0
5458. c9h18rCqE=oh+c4h8+nc4h9hco 7.25E+15 -0.4 27996.0
5459. c9h18rBqA=oh+c9h18o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
5460. c9h18rCqA=oh+c9h18o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
5461. c9h18rDqA=oh+c9h18o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
5462. c9h18rEqA=oh+c9h18o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
5463. c9h18rAqB=oh+c9h18o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
5464. c9h18rCqB=oh+c9h18o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
5465. c9h18rDqB=oh+c9h18o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
5466. c9h18rEqB=oh+c9h18o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
5467. c9h18rFqB=oh+c9h18o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
5468. c9h18rAqC=oh+c9h18o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
5469. c9h18rBqC=oh+c9h18o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
5470. c9h18rDqC=oh+c9h18o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
5471. c9h18rEqC=oh+c9h18o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
5472. c9h18rFqC=oh+c9h18o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
5473. c9h18rGqC=oh+c9h18o-CG 1.70E+08 0.0 1950.0
5474. c9h18rAqD=oh+c9h18o-AD 3.60E+09 0.0 7000.0
5475. c9h18rBqD=oh+c9h18o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
5476. c9h18rCqD=oh+c9h18o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
5477. c9h18rEqD=oh+c9h18o-DE 1.38E+12 0.0 15900.0
5478. c9h18rFqD=oh+c9h18o-DF 2.04E+11 0.0 19500.0
5479. c9h18rGqD=oh+c9h18o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
5480. c9h18rHqD=oh+c9h18o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
5481. c9h18rAqE=oh+c9h18o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
5482. c9h18rBqE=oh+c9h18o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
5483. c9h18rCqE=oh+c9h18o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
5484. c9h18rDqE=oh+c9h18o-DE 1.38E+12 0.0 15900.0
5485. ho2+c9h18-1=c9h18rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
5486. ho2+c9h18-1=c9h18rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0

5487. ho2+c9h18-2=c9h18rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
5488. ho2+c9h18-2=c9h18rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
5489. ho2+c9h18-3=c9h18rCqD 1.50E+11 0.0 7800.0
5490. ho2+c9h18-3=c9h18rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
5491. ho2+c9h18-4=c9h18rEqD 1.50E+11 0.0 7800.0
5492. ho2+c9h18-4=c9h18rDqE 1.50E+11 0.0 7800.0
5493. c9h18qjBqA=>oh+c9h17oAqB 3.35E+09 1.0 33500.0
5494. c9h18qjCqA=>oh+c9h17oAqC 5.75E+08 1.0 26000.0
5495. c9h18qjDqA=>oh+c9h17oAqD 9.89E+07 1.0 23000.0
5496. c9h18qjEqA=>oh+c9h17oAqE 1.70E+07 1.0 22000.0
5497. c9h18qjAqB=>oh+c9h17oBqA 1.68E+09 1.0 30500.0
5498. c9h18qjCqB=>oh+c9h17oBqC 1.68E+09 1.0 30500.0
5499. c9h18qjDqB=>oh+c9h17oBqD 2.88E+08 1.0 23000.0
5500. c9h18qjEqB=>oh+c9h17oBqE 4.94E+07 1.0 22000.0
5501. c9h18qjFqB=>oh+c9h17oBqF 8.50E+06 1.0 19000.0
5502. c9h18qjAqC=>oh+c9h17oCqA 2.88E+08 1.0 23000.0
5503. c9h18qjBqC=>oh+c9h17oCqB 1.68E+09 1.0 30500.0
5504. c9h18qjDqC=>oh+c9h17oCqD 1.68E+09 1.0 30500.0
5505. c9h18qjEqC=>oh+c9h17oCqE 2.88E+08 1.0 23000.0
5506. c9h18qjFqC=>oh+c9h17oCqF 4.94E+07 1.0 20000.0
5507. c9h18qjGqC=>oh+c9h17oCqG 8.50E+06 1.0 19000.0
5508. c9h18qjAqD=>oh+c9h17oDqA 4.94E+07 1.0 20000.0
5509. c9h18qjBqD=>oh+c9h17oDqB 2.88E+08 1.0 23000.0
5510. c9h18qjCqD=>oh+c9h17oDqC 1.68E+09 1.0 30500.0
5511. c9h18qjEqD=>oh+c9h17oDqE 1.68E+09 1.0 30500.0
5512. c9h18qjFqD=>oh+c9h17oDqF 2.88E+08 1.0 23000.0
5513. c9h18qjGqD=>oh+c9h17oDqG 4.94E+07 1.0 20000.0
5514. c9h18qjHqD=>oh+c9h17oDqH 8.50E+06 1.0 19000.0
5515. c9h18qjAqE=>oh+c9h17oEqA 8.50E+06 1.0 19000.0
5516. c9h18qjBqE=>oh+c9h17oEqB 4.94E+07 1.0 20000.0
5517. c9h18qjCqE=>oh+c9h17oEqC 2.88E+08 1.0 23000.0
5518. c9h18qjDqE=>oh+c9h17oEqD 1.68E+09 1.0 30500.0
5519. c9h17oAqB=oh+hco+c7h15hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5520. c9h17oAqC=oh+ch2hco+c6h13hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5521. c9h17oAqD=oh+ch2ch2hco+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5522. c9h17oAqE=oh+c3h6cho-1+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5523. c9h17oBqA=oh+ch2o+c7h15co 1.00E+16 0.0 43000.0
5524. c9h17oBqC=oh+ch3co+c6h13hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5525. c9h17oBqD=oh+ch2coch3+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5526. c9h17oBqE=oh+ch3coc2h4p+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5527. c9h17oBqF=oh+c3h6coch3-1+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5528. c9h17oCqA=oh+ch2o+nc6h13coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
5529. c9h17oCqB=oh+ch3hco+c6h13co 1.00E+16 0.0 43000.0
5530. c9h17oCqD=oh+c2h5co+c5h11hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5531. c9h17oCqE=oh+c2h5coch2+nc4h9hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5532. c9h17oCqF=oh+c2h5coc2h4p+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5533. c9h17oCqG=oh+c2h5coc3h6-1+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
5534. c9h17oDqA=oh+ch2o+nc5h11coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
5535. c9h17oDqB=oh+ch3hco+nc5h11coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
5536. c9h17oDqC=oh+ethco+c5h11co 1.00E+16 0.0 43000.0
5537. c9h17oDqE=oh+nc4h9hco+c3h7co 1.00E+16 0.0 43000.0
5538. c9h17oDqF=oh+nc3h7coch2+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5539. c9h17oDqG=oh+nc3h7coc2h4p+ethco 1.00E+16 0.0 43000.0
5540. c9h17oDqH=oh+nc3h7coc3h6-1+ch3hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5541. c9h17oEqA=oh+ch2o+nc4h9coc3h6-1 1.00E+16 0.0 43000.0
5542. c9h17oEqB=oh+ch3hco+nc4h9coc2h4p 1.00E+16 0.0 43000.0
5543. c9h17oEqC=oh+ethco+nc4h9coch2 1.00E+16 0.0 43000.0
5544. c9h17oEqD=oh+nc4h9co+nc3h7hco 1.00E+16 0.0 43000.0
5545. c9h18o-AB+h=>h2+acrol+Ac6h13 4.80E+08 1.5 2785.0
5546. c9h18o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac6h13 2.40E+06 2.0 -1192.0
5547. c9h18o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac6h13 2.50E+04 2.5 11605.0

5548. c9h18o-AB+h=>h2+ch2co+Ac7h15 2.40E+08 1.5 2005.0
5549. c9h18o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac7h15 1.20E+06 2.0 -1192.0
5550. c9h18o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac7h15 1.00E+04 2.5 9400.0
5551. c9h18o-BC+h=>h2+mvk+Ac5h11 2.40E+08 1.5 2005.0
5552. c9h18o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac5h11 1.20E+06 2.0 -1192.0
5553. c9h18o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac5h11 1.00E+04 2.5 9400.0
5554. c9h18o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac6h13 2.40E+08 1.5 2005.0
5555. c9h18o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac6h13 1.20E+06 2.0 -1192.0
5556. c9h18o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac6h13 1.00E+04 2.5 9400.0
5557. c9h18o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
5558. c9h18o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
5559. c9h18o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
5560. c9h18o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc5h11 2.40E+08 1.5 2005.0
5561. c9h18o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc5h11 1.20E+06 2.0 -1192.0
5562. c9h18o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc5h11 1.00E+04 2.5 9400.0
5563. c9h18o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
5564. c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
5565. c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
5566. c9h18o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
5567. c9h18o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
5568. c9h18o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
5569. c9h18o-AC+h=>h2+c8h16-1+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
5570. c9h18o-AC+oh=>h2o+c8h16-1+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
5571. c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c8h16-1+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
5572. c9h18o-AC+h=>h2+c2h4+c6h13co 2.40E+08 1.5 2005.0
5573. c9h18o-AC+oh=>h2o+c2h4+c6h13co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5574. c9h18o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c6h13co 1.00E+04 2.5 9400.0
5575. c9h18o-BD+h=>h2+ch3co+c7h14-1 2.40E+08 1.5 2005.0
5576. c9h18o-BD+oh=>h2o+ch3co+c7h14-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
5577. c9h18o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c7h14-1 1.00E+04 2.5 9400.0
5578. c9h18o-BD+h=>h2+c3h6+c5h11co 2.40E+08 1.5 2005.0
5579. c9h18o-BD+oh=>h2o+c3h6+c5h11co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5580. c9h18o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c5h11co 1.00E+04 2.5 9400.0
5581. c9h18o-CE+h=>h2+c6h12-1+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
5582. c9h18o-CE+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5583. c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
5584. c9h18o-CE+h=>h2+c4h8+nc4h9co 2.40E+08 1.5 2005.0
5585. c9h18o-CE+oh=>h2o+c4h8+nc4h9co 1.20E+06 2.0 -1192.0
5586. c9h18o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9co 1.00E+04 2.5 9400.0
5587. c9h18o-DF+h=>h2+c5h10+c3h7co 4.80E+08 1.5 2005.0
5588. c9h18o-DF+oh=>h2o+c5h10+c3h7co 2.40E+06 2.0 -1192.0
5589. c9h18o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+c3h7co 2.00E+04 2.5 9400.0
5590. c9h18o-AD+h=>h2+c2h4+nc5h11coch2 4.80E+08 1.5 2785.0
5591. c9h18o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coch2 2.40E+06 2.0 -1192.0
5592. c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coch2 2.50E+04 2.5 11605.0
5593. c9h18o-AD+h=>h2+c7h14-1+ch2hco 2.40E+08 1.5 2005.0
5594. c9h18o-AD+oh=>h2o+c7h14-1+ch2hco 1.20E+06 2.0 -1192.0
5595. c9h18o-AD+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2hco 1.00E+04 2.5 9400.0
5596. c9h18o-BE+h=>h2+c6h12-1+ch2coch3 2.40E+08 1.5 2005.0
5597. c9h18o-BE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2coch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
5598. c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
5599. c9h18o-BE+h=>h2+c3h6+nc4h9coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
5600. c9h18o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc4h9coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
5601. c9h18o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
5602. c9h18o-CF+h=>h2+c5h10+c2h5coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
5603. c9h18o-CF+oh=>h2o+c5h10+c2h5coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
5604. c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c5h10+c2h5coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
5605. c9h18o-CF+h=>h2+c4h8+nc3h7coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
5606. c9h18o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
5607. c9h18o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
5608. c9h18o-AE+h=>h2+c6h12-1+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0

5609. c9h18o-AE+oh=>h2o+c6h12-1+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
5610. c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c6h12-1+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
5611. c9h18o-AE+h=>h2+c2h4+nc4h9coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5612. c9h18o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5613. c9h18o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc4h9coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5614. c9h18o-BF+h=>h2+c5h10+ch3coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5615. c9h18o-BF+oh=>h2o+c5h10+ch3coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5616. c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c5h10+ch3coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5617. c9h18o-BF+h=>h2+c3h6+nc3h7coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
5618. c9h18o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
5619. c9h18o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc3h7coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
5620. c9h18o-CG+h=>h2+c4h8+c2h5coc2h4p 4.80E+08 1.5 2005.0
5621. c9h18o-CG+oh=>h2o+c4h8+c2h5coc2h4p 2.40E+06 2.0 -1192.0
5622. c9h18o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+c2h5coc2h4p 2.00E+04 2.5 9400.0
5623. c9h18-1+ho2=oh+c9h18o-AB 1.00E+12 0.0 14400.0
5624. c9h18-2+ho2=oh+c9h18o-BC 1.00E+12 0.0 14400.0
5625. c9h18-3+ho2=oh+c9h18o-CD 1.00E+12 0.0 14400.0
5626. c9h18-4+ho2=oh+c9h18o-DE 1.00E+12 0.0 14400.0
5627. nonanone+h=>h2+ch2co+ch3+3c2h4 2.70E+07 2.0 5000.0
5628. nonanone+oh=>h2o+ch2co+ch3+3c2h4 7.80E+06 2.0 -765.0
5629. nonanone+ho2=>h2o2+ch2co+ch3+3c2h4 1.20E+12 0.0 15500.0
5630. nonanone+ch3=>ch4+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
5631. nonanone+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 9600.0
5632. nonanone+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3+3c2h4 6.00E+11 0.0 11000.0
5633. c8h15hco=Hc8h15-1+hco 7.25E+16 0.0 82400.0
5634. c8h15hco+o2=c8h15co+ho2 2.00E+13 0.5 42200.0
5635. c8h15hco+ho2=c8h15co+h2o2 1.70E+12 0.0 10700.0
5636. c8h15hco+oh=c8h15co+h2o 2.35E+10 0.7 -1113.0
5637. c8h15hco+o=c8h15co+oh 5.85E+12 0.0 1808.0
5638. c8h15hco+h=c8h15co+h2 5.54E+02 3.5 5167.0
5639. c8h15hco+ch3=c8h15co+ch4 2.25E+00 4.0 8285.0
5640. c8h15hco+c2h5=c8h15co+c2h6 1.64E+00 3.6 9141.0
5641. c8h15hco+hco=c8h15co+ch2o 4.70E+04 2.7 18235.0
5642. c8h15hco+c2h3=c8h15co+c2h4 8.50E+09 0.0 6000.0
5643. c8h15co=Hc8h15-1+co 2.00E+13 0.0 28700.0
5644. c8h15co+ho2=>co2+oh+Hc8h15-1 2.00E+13 0.0 0.0
5645. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
5646. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5647. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5648. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5649. nc10h22+c10h21qjA=c10h21qA+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5650. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
5651. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5652. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5653. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5654. nc10h22+c10h21qjB=c10h21qB+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5655. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
5656. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5657. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5658. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5659. nc10h22+c10h21qjC=c10h21qC+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5660. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
5661. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5662. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5663. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5664. nc10h22+c10h21qjD=c10h21qD+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5665. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ac10h21 1.20E+13 0.0 20000.0
5666. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Bc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5667. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Cc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5668. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Dc10h21 6.00E+12 0.0 17500.0
5669. nc10h22+c10h21qjE=c10h21qE+Ec10h21 6.00E+12 0.0 17500.0

5670.	Ac10h21+o2=c10h21qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
5671.	Bc10h21+o2=c10h21qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
5672.	Cc10h21+o2=c10h21qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
5673.	Dc10h21+o2=c10h21qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
5674.	Ec10h21+o2=c10h21qjE	1.80E+19	-2.5	0.0
5675.	Ac10h21+ho2=c10h21ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5676.	Bc10h21+ho2=c10h21ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5677.	Cc10h21+ho2=c10h21ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5678.	Dc10h21+ho2=c10h21ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5679.	Ec10h21+ho2=c10h21ojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
5680.	Ac10h21+ch3o2=c10h21ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5681.	Bc10h21+ch3o2=c10h21ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5682.	Cc10h21+ch3o2=c10h21ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5683.	Dc10h21+ch3o2=c10h21ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5684.	Ec10h21+ch3o2=c10h21ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5685.	Ac10h21+c2h5o2=c10h21ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5686.	Bc10h21+c2h5o2=c10h21ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5687.	Cc10h21+c2h5o2=c10h21ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5688.	Dc10h21+c2h5o2=c10h21ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5689.	Ec10h21+c2h5o2=c10h21ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5690.	Ac10h21+nc3h7o2=c10h21ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5691.	Bc10h21+nc3h7o2=c10h21ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5692.	Cc10h21+nc3h7o2=c10h21ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5693.	Dc10h21+nc3h7o2=c10h21ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5694.	Ec10h21+nc3h7o2=c10h21ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5695.	Ac10h21+ic3h7o2=c10h21ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5696.	Bc10h21+ic3h7o2=c10h21ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5697.	Cc10h21+ic3h7o2=c10h21ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5698.	Dc10h21+ic3h7o2=c10h21ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5699.	Ec10h21+ic3h7o2=c10h21ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
5700.	Ac10h21+c10h21qjA=2c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5701.	Bc10h21+c10h21qjA=c10h21ojB+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5702.	Cc10h21+c10h21qjA=c10h21ojC+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5703.	Dc10h21+c10h21qjA=c10h21ojD+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5704.	Ec10h21+c10h21qjA=c10h21ojE+c10h21ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
5705.	Ac10h21+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5706.	Bc10h21+c10h21qjB=2c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5707.	Cc10h21+c10h21qjB=c10h21ojC+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5708.	Dc10h21+c10h21qjB=c10h21ojD+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5709.	Ec10h21+c10h21qjB=c10h21ojE+c10h21ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
5710.	Ac10h21+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5711.	Bc10h21+c10h21qjC=c10h21ojB+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5712.	Cc10h21+c10h21qjC=2c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5713.	Dc10h21+c10h21qjC=c10h21ojD+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5714.	Ec10h21+c10h21qjC=c10h21ojE+c10h21ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
5715.	Ac10h21+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5716.	Bc10h21+c10h21qjD=c10h21ojB+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5717.	Cc10h21+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5718.	Dc10h21+c10h21qjD=2c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5719.	Ec10h21+c10h21qjD=c10h21ojE+c10h21ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
5720.	Ac10h21+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5721.	Bc10h21+c10h21qjE=c10h21ojB+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5722.	Cc10h21+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5723.	Dc10h21+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5724.	Ec10h21+c10h21qjE=2c10h21ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
5725.	c10h21ojA=ch2o+Ac9h19	2.10E+22	-2.6	12941.0
5726.	c10h21ojB=ch3hco+Ac8h17	8.42E+09	1.2	9888.0
5727.	c10h21ojB=ch3+c8h17hco	5.28E+09	1.2	13999.0
5728.	c10h21ojC=ethco+Ac7h15	1.90E+10	1.1	9825.0
5729.	c10h21ojC=c2h5+c7h15hco	3.89E+12	0.5	9071.0
5730.	c10h21ojD=nc3h7+c6h13hco	1.22E+12	0.6	10063.0
5731.	c10h21ojD=nc3h7hco+Ac6h13	5.67E+13	0.2	10812.0
5732.	c10h21ojE=pc4h9+c5h11hco	2.60E+14	-0.1	11248.5
5733.	c10h21ojE=nc4h9hco+Ac5h11	8.89E+11	0.6	10405.0
5734.	c10h21qA=oh+c10h21ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
5735.	c10h21qB=oh+c10h21ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
5736.	c10h21qC=oh+c10h21ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
5737.	c10h21qD=oh+c10h21ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
5738.	c10h21qE=oh+c10h21ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
5739.	c10h21qjA=c10h20rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
5740.	c10h21qjA=c10h20rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
5741.	c10h21qjA=c10h20rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
5742.	c10h21qjA=c10h20rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
5743.	c10h21qjB=c10h20rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
5744.	c10h21qjB=c10h20rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
5745.	c10h21qjB=c10h20rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
5746.	c10h21qjB=c10h20rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
5747.	c10h21qjB=c10h20rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
5748.	c10h21qjC=c10h20rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
5749.	c10h21qjC=c10h20rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
5750.	c10h21qjC=c10h20rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
5751.	c10h21qjC=c10h20rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
5752.	c10h21qjC=c10h20rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
5753.	c10h21qjC=c10h20rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
5754.	c10h21qjD=c10h20rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
5755.	c10h21qjD=c10h20rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
5756.	c10h21qjD=c10h20rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
5757.	c10h21qjD=c10h20rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
5758.	c10h21qjD=c10h20rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
5759.	c10h21qjD=c10h20rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
5760.	c10h21qjD=c10h20rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
5761.	c10h21qjE=c10h20rAqE	4.35E+06	1.0	24000.0
5762.	c10h21qjE=c10h20rBqE	1.70E+07	1.0	22000.0
5763.	c10h21qjE=c10h20rCqE	9.90E+07	1.0	25000.0
5764.	c10h21qjE=c10h20rDqE	5.70E+08	1.0	32500.0
5765.	c10h21qjE=c10h20rFqE	5.70E+08	1.0	32500.0
5766.	c10h21qjE=c10h20rGqE	9.90E+07	1.0	25000.0
5767.	c10h21qjE=c10h20rHqE	1.70E+07	1.0	22000.0
5768.	c10h21qjE=c10h20rIqE	2.90E+06	1.0	21000.0
5769.	c10h21qjA+ho2=c10h21qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5770.	c10h21qjB+ho2=c10h21qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5771.	c10h21qjC+ho2=c10h21qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5772.	c10h21qjD+ho2=c10h21qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5773.	c10h21qjE+ho2=c10h21qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
5774.	c10h21qjA+h2o2=c10h21qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5775.	c10h21qjB+h2o2=c10h21qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5776.	c10h21qjC+h2o2=c10h21qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5777.	c10h21qjD+h2o2=c10h21qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5778.	c10h21qjE+h2o2=c10h21qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
5779.	c10h21qjA+ho2=c10h21ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5780.	c10h21qjB+ho2=c10h21ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5781.	c10h21qjC+ho2=c10h21ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5782.	c10h21qjD+ho2=c10h21ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5783.	c10h21qjE+ho2=c10h21ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
5784.	c10h21qjA+ch3o2=c10h21ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5785.	c10h21qjB+ch3o2=c10h21ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5786.	c10h21qjC+ch3o2=c10h21ojC+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5787.	c10h21qjD+ch3o2=c10h21ojD+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5788.	c10h21qjE+ch3o2=c10h21ojE+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5789.	c10h21qjA+c10h21qjA=c10h21ojA+c10h21ojA+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5790.	c10h21qjA+c10h21qjB=c10h21ojA+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5791.	c10h21qjA+c10h21qjC=c10h21ojA+c10h21ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5792.	c10h21qjA+c10h21qjD=c10h21ojA+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5793.	c10h21qjA+c10h21qjE=c10h21ojA+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5794.	c10h21qjB+c10h21qjB=c10h21ojB+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5795.	c10h21qjB+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5796.	c10h21qjB+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5797.	c10h21qjB+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojB+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5798.	c10h21qjC+c10h21qjC=c10h21ojC+c10h21ojC+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5799.	c10h21qjC+c10h21qjD=c10h21ojC+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5800.	c10h21qjC+c10h21qjE=c10h21ojC+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5801.	c10h21qjD+c10h21qjD=c10h21ojD+c10h21ojD+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5802.	c10h21qjD+c10h21qjE=c10h21ojD+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5803.	c10h21qjE+c10h21qjE=c10h21ojE+c10h21ojE+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
5804.	c10h20rBqA+o2=c10h20qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
5805.	c10h20rCqA+o2=c10h20qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5806.	c10h20rDqA+o2=c10h20qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5807.	c10h20rEqA+o2=c10h20qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
5808.	c10h20rAqB+o2=c10h20qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
5809.	c10h20rCqB+o2=c10h20qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5810.	c10h20rDqB+o2=c10h20qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5811.	c10h20rEqB+o2=c10h20qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5812.	c10h20rFqB+o2=c10h20qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
5813.	c10h20rAqC+o2=c10h20qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
5814.	c10h20rBqC+o2=c10h20qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
5815.	c10h20rDqC+o2=c10h20qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5816.	c10h20rEqC+o2=c10h20qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5817.	c10h20rFqC+o2=c10h20qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5818.	c10h20rGqC+o2=c10h20qjGqC	1.80E+19	-2.5	0.0
5819.	c10h20rAqD+o2=c10h20qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
5820.	c10h20rBqD+o2=c10h20qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
5821.	c10h20rCqD+o2=c10h20qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5822.	c10h20rEqD+o2=c10h20qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5823.	c10h20rFqD+o2=c10h20qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5824.	c10h20rGqD+o2=c10h20qjGqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5825.	c10h20rHqD+o2=c10h20qjHqD	1.80E+19	-2.5	0.0
5826.	c10h20rAqE+o2=c10h20qjAqE	9.00E+18	-2.5	0.0
5827.	c10h20rBqE+o2=c10h20qjBqE	1.70E+19	-2.5	0.0
5828.	c10h20rCqE+o2=c10h20qjCqE	1.80E+19	-2.5	0.0
5829.	c10h20rDqE+o2=c10h20qjDqE	1.80E+19	-2.5	0.0
5830.	c10h20rFqE+o2=c10h20qjFqE	1.80E+19	-2.5	0.0
5831.	c10h20rGqE+o2=c10h20qjGqE	1.80E+19	-2.5	0.0
5832.	c10h20rHqE+o2=c10h20qjHqE	1.80E+19	-2.5	0.0
5833.	c10h20rIqE+o2=c10h20qjIqE	1.70E+19	-2.5	0.0
5834.	c10h20rCqA=oh+ch2o+c9h18-1	3.67E+12	0.5	28377.0
5835.	c10h20rDqB=oh+ch3hco+c8h16-1	1.27E+18	-1.1	29189.0
5836.	c10h20rAqC=oh+c7h15hco+c2h4	6.38E+15	-0.5	28717.0
5837.	c10h20rEqC=oh+ethco+c7h14-1	5.46E+17	-1.0	28585.0
5838.	c10h20rBqD=oh+c6h13hco+c3h6	1.24E+15	-0.2	27943.0
5839.	c10h20rFqD=oh+nc3h7hco+c6h12-1	1.30E+17	-0.8	28398.0
5840.	c10h20rCqE=oh+c5h11hco+c4h8	8.47E+15	-0.4	28015.0
5841.	c10h20rGqE=oh+nc4h9hco+c5h10	4.49E+16	-0.7	28240.0
5842.	c10h20rBqA=oh+c10h20o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
5843.	c10h20rCqA=oh+c10h20o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
5844.	c10h20rDqA=oh+c10h20o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
5845.	c10h20rEqA=oh+c10h20o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
5846.	c10h20rAqB=oh+c10h20o-AB	1.38E+12	0.0	15900.0
5847.	c10h20rCqB=oh+c10h20o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
5848.	c10h20rDqB=oh+c10h20o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
5849.	c10h20rEqB=oh+c10h20o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
5850.	c10h20rFqB=oh+c10h20o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
5851.	c10h20rAqC=oh+c10h20o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
5852.	c10h20rBqC=oh+c10h20o-BC	1.38E+12	0.0	15900.0
5853.	c10h20rDqC=oh+c10h20o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
5854.	c10h20rEqC=oh+c10h20o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
5855.	c10h20rFqC=oh+c10h20o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
5856.	c10h20rGqC=oh+c10h20o-CG	1.70E+08	0.0	1950.0
5857.	c10h20rAqD=oh+c10h20o-AD	3.63E+10	0.0	13000.0
5858.	c10h20rBqD=oh+c10h20o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
5859.	c10h20rCqD=oh+c10h20o-CD	1.38E+12	0.0	15900.0
5860.	c10h20rEqD=oh+c10h20o-DE	1.38E+12	0.0	15900.0
5861.	c10h20rFqD=oh+c10h20o-DF	2.04E+11	0.0	19500.0
5862.	c10h20rGqD=oh+c10h20o-DG	3.63E+10	0.0	13000.0
5863.	c10h20rHqD=oh+c10h20o-CG	1.70E+08	0.0	1950.0
5864.	c10h20rAqE=oh+c10h20o-AE	1.70E+08	0.0	1950.0
5865.	c10h20rBqE=oh+c10h20o-BE	3.63E+10	0.0	13000.0
5866.	c10h20rCqE=oh+c10h20o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
5867.	c10h20rDqE=oh+c10h20o-DE	2.95E+11	0.0	22000.0
5868.	c10h20rFqE=oh+c10h20o-EF	2.95E+11	0.0	22000.0
5869.	c10h20rGqE=oh+c10h20o-DF	2.04E+11	0.0	19500.0
5870.	c10h20rHqE=oh+c10h20o-CF	3.63E+10	0.0	13000.0
5871.	c10h20rIqE=oh+c10h20o-BF	1.70E+08	0.0	1950.0
5872.	ho2+c10h20-1=c10h20rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
5873.	ho2+c10h20-1=c10h20rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
5874.	ho2+c10h20-2=c10h20rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
5875.	ho2+c10h20-2=c10h20rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
5876.	ho2+c10h20-3=c10h20rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
5877.	ho2+c10h20-3=c10h20rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
5878.	ho2+c10h20-4=c10h20rDqE	1.50E+11	0.0	7800.0
5879.	ho2+c10h20-4=c10h20rEqD	1.50E+11	0.0	7800.0
5880.	ho2+c10h20-5=c10h20rFqE	1.50E+11	0.0	7800.0
5881.	c10h20qjBqA=oh+c10h19oAqB	3.35E+09	1.0	33500.0
5882.	c10h20qjCqA=oh+c10h19oAqC	5.75E+08	1.0	26000.0
5883.	c10h20qjDqA=oh+c10h19oAqD	9.89E+07	1.0	23000.0
5884.	c10h20qjEqA=oh+c10h19oAqE	1.70E+07	1.0	22000.0
5885.	c10h20qjAqB=oh+c10h19oBqA	1.68E+09	1.0	30500.0
5886.	c10h20qjCqB=oh+c10h19oBqC	1.68E+09	1.0	30500.0
5887.	c10h20qjDqB=oh+c10h19oBqD	2.88E+08	1.0	23000.0
5888.	c10h20qjEqB=oh+c10h19oBqE	4.94E+07	1.0	20000.0
5889.	c10h20qjFqB=oh+c10h19oBqF	8.50E+06	1.0	19000.0
5890.	c10h20qjAqC=oh+c10h19oCqA	2.88E+08	1.0	23000.0
5891.	c10h20qjBqC=oh+c10h19oCqB	1.68E+09	1.0	30500.0
5892.	c10h20qjDqC=oh+c10h19oCqD	1.68E+09	1.0	30500.0
5893.	c10h20qjEqC=oh+c10h19oCqE	2.88E+08	1.0	23000.0
5894.	c10h20qjFqC=oh+c10h19oCqF	4.94E+07	1.0	20000.0
5895.	c10h20qjGqC=oh+c10h19oCqG	8.50E+06	1.0	19000.0
5896.	c10h20qjAqD=oh+c10h19oDqA	4.94E+07	1.0	20000.0
5897.	c10h20qjBqD=oh+c10h19oDqB	2.88E+08	1.0	23000.0
5898.	c10h20qjCqD=oh+c10h19oDqC	1.68E+09	1.0	30500.0
5899.	c10h20qjEqD=oh+c10h19oDqE	1.68E+09	1.0	30500.0
5900.	c10h20qjFqD=oh+c10h19oDqF	2.88E+08	1.0	23000.0
5901.	c10h20qjGqD=oh+c10h19oDqG	4.94E+07	1.0	20000.0
5902.	c10h20qjHqD=oh+c10h19oDqH	8.50E+06	1.0	19000.0
5903.	c10h20qjAqE=oh+c10h19oEqA	8.50E+06	1.0	19000.0
5904.	c10h20qjBqE=oh+c10h19oEqB	4.94E+07	1.0	20000.0
5905.	c10h20qjCqE=oh+c10h19oEqC	2.88E+08	1.0	23000.0
5906.	c10h20qjDqE=oh+c10h19oEqD	1.68E+09	1.0	30500.0
5907.	c10h20qjFqE=oh+c10h19oEqF	1.68E+09	1.0	30500.0
5908.	c10h20qjGqE=oh+c10h19oEqG	2.88E+08	1.0	23000.0
5909.	c10h20qjHqE=oh+c10h19oEqH	4.94E+07	1.0	20000.0
5910.	c10h20qjIqE=oh+c10h19oEqI	8.50E+06	1.0	19000.0
5911.	c10h19oAqB=>oh+hco+c8h17hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5912.	c10h19oAqC=>oh+ch2hco+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5913.	c10h19oAqD=>oh+ch2ch2hco+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0

5914.	c10h19oAqE=>oh+c3h6cho-1+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5915.	c10h19oBqA=>oh+ch2o+c8h17co	1.00E+16	0.0	43000.0
5916.	c10h19oBqC=>oh+ch3co+c7h15hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5917.	c10h19oBqD=>oh+ch2coch3+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5918.	c10h19oBqE=>oh+ch3coc2h4p+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5919.	c10h19oBqF=>oh+c3h6coch3-1+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5920.	c10h19oCqA=>oh+ch2o+nc7h15coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
5921.	c10h19oCqB=>oh+ch3hco+c7h15co	1.00E+16	0.0	43000.0
5922.	c10h19oCqD=>oh+c2h5co+c6h13hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5923.	c10h19oCqE=>oh+c2h5coch2+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5924.	c10h19oCqF=>oh+c2h5coc2h4p+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5925.	c10h19oCqG=>oh+c2h5coc3h6-1+nc3h7hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5926.	c10h19oDqA=>oh+ch2o+nc6h13coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
5927.	c10h19oDqB=>oh+ch3hco+nc6h13coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
5928.	c10h19oDqC=>oh+ethco+c6h13co	1.00E+16	0.0	43000.0
5929.	c10h19oDqE=>oh+c3h7co+c5h11hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5930.	c10h19oDqF=>oh+nc4h9hco+nc3h7coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
5931.	c10h19oDqG=>oh+nc3h7hco+nc3h7coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
5932.	c10h19oDqH=>oh+ethco+nc3h7coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
5933.	c10h19oEqA=>oh+ch2o+nc5h11coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
5934.	c10h19oEqB=>oh+ch3hco+nc5h11coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
5935.	c10h19oEqC=>oh+ethco+nc5h11coch2	1.00E+16	0.0	43000.0
5936.	c10h19oEqD=>oh+nc3h7hco+c5h11co	1.00E+16	0.0	43000.0
5937.	c10h19oEqF=>oh+nc4h9co+nc4h9hco	1.00E+16	0.0	43000.0
5938.	c10h19oEqG=>oh+nc3h7hco+ch2co+pc4h9	1.00E+16	0.0	43000.0
5939.	c10h19oEqH=>oh+ethco+nc4h9coc2h4p	1.00E+16	0.0	43000.0
5940.	c10h19oEqI=>oh+ch3hco+nc4h9coc3h6-1	1.00E+16	0.0	43000.0
5941.	c10h20o-AB+h=>h2+acrol+Ac7h15	4.80E+08	1.5	2785.0
5942.	c10h20o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac7h15	2.40E+06	2.0	-1192.0
5943.	c10h20o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac7h15	2.50E+04	2.5	11605.0
5944.	c10h20o-AB+h=>h2+ch2co+Ac8h17	2.40E+08	1.5	2005.0
5945.	c10h20o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac8h17	1.20E+06	2.0	-1192.0
5946.	c10h20o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac8h17	1.00E+04	2.5	9400.0
5947.	c10h20o-BC+h=>h2+mvk+Ac6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
5948.	c10h20o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
5949.	c10h20o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
5950.	c10h20o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac7h15	2.40E+08	1.5	2005.0
5951.	c10h20o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac7h15	1.20E+06	2.0	-1192.0
5952.	c10h20o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac7h15	1.00E+04	2.5	9400.0
5953.	c10h20o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac5h11	2.40E+08	1.5	2005.0
5954.	c10h20o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac5h11	1.20E+06	2.0	-1192.0
5955.	c10h20o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac5h11	1.00E+04	2.5	9400.0
5956.	c10h20o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
5957.	c10h20o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
5958.	c10h20o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
5959.	c10h20o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+pc4h9	2.40E+08	1.5	2005.0
5960.	c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+pc4h9	1.20E+06	2.0	-1192.0
5961.	c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+pc4h9	1.00E+04	2.5	9400.0
5962.	c10h20o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc5h11	2.40E+08	1.5	2005.0
5963.	c10h20o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc5h11	1.20E+06	2.0	-1192.0
5964.	c10h20o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc5h11	1.00E+04	2.5	9400.0
5965.	c10h20o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+nc3h7	4.80E+08	1.5	2005.0
5966.	c10h20o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+nc3h7	2.40E+06	2.0	-1192.0
5967.	c10h20o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
5968.	c10h20o-AC+h=>h2+c9h18-1+hco	4.80E+08	1.5	2785.0
5969.	c10h20o-AC+oh=>h2o+c9h18-1+hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
5970.	c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c9h18-1+hco	2.50E+04	2.5	11605.0
5971.	c10h20o-AC+h=>h2+c2h4+c7h15co	2.40E+08	1.5	2005.0
5972.	c10h20o-AC+oh=>h2o+c2h4+c7h15co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5973.	c10h20o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c7h15co	1.00E+04	2.5	9400.0
5974.	c10h20o-BD+h=>h2+ch3co+c8h16-1	2.40E+08	1.5	2005.0
5975.	c10h20o-BD+oh=>h2o+ch3co+c8h16-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
5976.	c10h20o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c8h16-1	1.00E+04	2.5	9400.0
5977.	c10h20o-BD+h=>h2+ch3c6+c6h13co	2.40E+08	1.5	2005.0
5978.	c10h20o-BD+oh=>h2o+c3h6+c6h13co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5979.	c10h20o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c6h13co	1.00E+04	2.5	9400.0
5980.	c10h20o-CE+h=>h2+c7h14-1+c2h5co	2.40E+08	1.5	2005.0
5981.	c10h20o-CE+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5982.	c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
5983.	c10h20o-CE+h=>h2+c4h8+c5h11co	2.40E+08	1.5	2005.0
5984.	c10h20o-CE+oh=>h2o+c4h8+c5h11co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5985.	c10h20o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c5h11co	1.00E+04	2.5	9400.0
5986.	c10h20o-DF+h=>h2+c6h12-1+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
5987.	c10h20o-DF+oh=>h2o+c6h12-1+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5988.	c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
5989.	c10h20o-DF+h=>h2+c5h10+nc4h9co	2.40E+08	1.5	2005.0
5990.	c10h20o-DF+oh=>h2o+c5h10+nc4h9co	1.20E+06	2.0	-1192.0
5991.	c10h20o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9co	1.00E+04	2.5	9400.0
5992.	c10h20o-AD+h=>h2+c2h4+nc6h13coch2	4.80E+08	1.5	2785.0
5993.	c10h20o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc6h13coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
5994.	c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13coch2	2.50E+04	2.5	11605.0
5995.	c10h20o-AD+h=>h2+c8h16-1+ch2hco	2.40E+08	1.5	2005.0
5996.	c10h20o-AD+oh=>h2o+c8h16-1+ch2hco	1.20E+06	2.0	-1192.0
5997.	c10h20o-AD+ho2=>h2o2+c8h16-1+ch2hco	1.00E+04	2.5	9400.0
5998.	c10h20o-BE+h=>h2+c7h14-1+ch2coch3	2.40E+08	1.5	2005.0
5999.	c10h20o-BE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2coch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
6000.	c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2coch3	1.00E+04	2.5	9400.0
6001.	c10h20o-BE+h=>h2+c3h6+nc5h11coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
6002.	c10h20o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc5h11coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
6003.	c10h20o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
6004.	c10h20o-CF+h=>h2+c6h12-1+c2h5coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
6005.	c10h20o-CF+oh=>h2o+c6h12-1+c2h5coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
6006.	c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c6h12-1+c2h5coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
6007.	c10h20o-CF+h=>h2+c4h8+nc4h9coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
6008.	c10h20o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc4h9coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
6009.	c10h20o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
6010.	c10h20o-DG+h=>h2+c5h10+nc3h7coch2	4.80E+08	1.5	2005.0
6011.	c10h20o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc3h7coch2	2.40E+06	2.0	-1192.0
6012.	c10h20o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc3h7coch2	4.00E+12	0.0	13260.0
6013.	c10h20o-AE+h=>h2+c7h14-1+ch2ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
6014.	c10h20o-AE+oh=>h2o+c7h14-1+ch2ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
6015.	c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c7h14-1+ch2ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
6016.	c10h20o-AE+h=>h2+c2h4+nc5h11coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
6017.	c10h20o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc5h11coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
6018.	c10h20o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc5h11coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
6019.	c10h20o-BF+h=>h2+Fc10h19oB	2.40E+08	1.5	2005.0
6020.	c10h20o-BF+oh=>h2o+Fc10h19oB	1.20E+06	2.0	-1192.0
6021.	c10h20o-BF+ho2=>h2o2+Fc10h19oB	1.00E+04	2.5	9400.0
6022.	c10h20o-BF+h=>h2+c3h6+nc4h9coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
6023.	c10h20o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc4h9coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
6024.	c10h20o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc4h9coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
6025.	c10h20o-CG+h=>h2+Gc10h19oC	2.40E+08	1.5	2005.0
6026.	c10h20o-CG+oh=>h2o+Gc10h19oC	1.20E+06	2.0	-1192.0
6027.	c10h20o-CG+ho2=>h2o2+Gc10h19oC	1.00E+04	2.5	9400.0
6028.	c10h20o-CG+h=>h2+c4h8+nc3h7coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
6029.	c10h20o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc3h7coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
6030.	c10h20o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc3h7coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
6031.	ch3coc2h4p+c6h12-1=Fc10h19oB	1.32E+04	2.5	6130.0
6032.	nc3h7+ch3coc5h9-1=Fc10h19oB	1.32E+04	2.5	6130.0
6033.	c2h5coc2h4p+c5h10=Gc10h19oC	1.32E+04	2.5	6130.0
6034.	c2h5+c2h5coc5h9-1=Gc10h19oC	1.32E+04	2.5	6130.0
6035.	c10h20-1+ho2=oh+c10h20o-AB	1.00E+12	0.0	14400.0
6036.	c10h20-2+ho2=oh+c10h20o-BC	1.00E+12	0.0	14400.0
6037.	c10h20-3+ho2=oh+c10h20o-CD	1.00E+12	0.0	14400.0
6038.	c10h20-4+ho2=oh+c10h20o-DE	1.00E+12	0.0	14400.0
6039.	c10h20-5+ho2=oh+c10h20o-EF	1.00E+12	0.0	14400.0
6040.	c9h19hco+h=h2+c9h19co	4.00E+13	0.0	4200.0
6041.	c9h19hco+oh=h2o+c9h19co	4.20E+12	0.0	500.0
6042.	c9h19hco+ho2=h2o2+c9h19co	1.00E+12	0.0	10000.0
6043.	c9h19hco+ch3=ch4+c9h19co	2.00E-06	5.6	2500.0
6044.	c9h19hco+c2h5=c2h6+c9h19co	1.30E+12	0.0	8500.0
6045.	c9h19hco+o2=ho2+c9h19co	1.00E+13	0.0	40700.0
6046.	c9h19co+M=co+Ac9h19+M	8.64E+15	0.0	14400.0
6047.	c9h19co+ho2=>co2+oh+Ac9h19	2.00E+13	0.0	0.0
6048.	choch2h2cho+oh=h2o+choch2h2co	5.38E+10	0.8	-340.0
6049.	choch2h2cho+h=h2+choch2h2co	8.00E+13	0.0	4200.0
6050.	choch2h2cho+o=oh+choch2h2co	1.00E+13	0.0	1790.0
6051.	choch2h2cho+ch3=ch4+choch2h2co	3.40E+12	0.0	8440.0
6052.	choch2h2cho+ho2=h2o2+choch2h2co	5.60E+12	0.0	13600.0
6053.	choch2h2cho+o2=ho2+choch2h2co	4.00E+13	0.5	42200.0
6054.	choch2h2co+M=co+ch2h2hco+M	8.64E+15	0.0	14400.0
6055.	choch2h2co+ho2=oh+co2+ch2h2hco	2.00E+13	0.0	0.0
6056.	nc7h15coch2=Ac7h15+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
6057.	nc7h15coch2+o2=nc7h15coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6058.	nc7h15coch2o2+ho2=nc7h15coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6059.	nc7h15coch2o2h=nc7h15coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6060.	ch2o+c7h15co=nc7h15coch2o	1.50E+11	0.0	11900.0
6061.	nc6h13coch2=Ac6h13+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
6062.	nc6h13coch2+o2=nc6h13coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6063.	nc6h13coch2o2+ho2=nc6h13coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6064.	nc6h13coch2o2h=nc6h13coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6065.	ch2o+c6h13co=nc6h13coch2o	1.50E+11	0.0	11900.0
6066.	nc5h11coch2=Ac5h11+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
6067.	nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6068.	nc5h11coch2o2+ho2=c7h13oBqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6069.	nc4h9coch2=pc4h9+ch2co	1.00E+13	0.0	28000.0
6070.	nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6071.	nc4h9coch2o2+ho2=c6h11oBqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6072.	c2h5coc3h6-1=c2h5coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000.0
6073.	c2h5coc3h6-1+o2=c2h5coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
6074.	c2h5coc3h6o2-1+ho2=c6h11oCqF+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6075.	nc3h7coc2h4p=c3h7co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
6076.	nc3h7coc2h4p+o2=nc3h7coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6077.	nc3h7coc2h4o2+ho2=c6h11oCqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6078.	nc4h9coc2h4p=nc4h9co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
6079.	nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6080.	nc4h9coc2h4o2+ho2=c7h13oCqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6081.	nc5h11coc2h4p=c5h11co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
6082.	nc5h11coc2h4p+o2=nc5h11coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6083.	nc5h11coc2h4o2+ho2=nc5h11coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6084.	nc5h11coc2h4o2h=nc5h11coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6085.	ch2o+nc5h11coch2=nc5h11coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900.0
6086.	nc6h13coc2h4p=c6h13co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840.0
6087.	nc6h13coc2h4p+o2=nc6h13coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0.0
6088.	nc6h13coc2h4o2+ho2=nc6h13coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6089.	nc6h13coc2h4o2h=nc6h13coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6090.	ch2o+nc6h13coch2=nc6h13coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900.0
6091.	nc3h7coc3h6-1=nc3h7coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000.0
6092.	nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
6093.	nc3h7coc3h6o2-1+ho2=c7h13oDqA+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6094.	c2h4+nc4h9coch2=nc4h9coc3h6-1	1.32E+04	2.5	6130.0
6095.	nc4h9coc3h6-1+o2=nc4h9coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
6096.	nc4h9coc3h6o2-1+ho2=nc4h9coc3h6o2h-1+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6097.	nc4h9coc3h6o2h-1=nc4h9coc3h6o-1+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6098.	ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o-1	1.50E+11	0.0	11900.0
6099.	c2h4+nc5h11coch2=nc5h11coc3h6-1	1.32E+04	2.5	6130.0
6100.	nc5h11coc3h6-1+o2=nc5h11coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0.0
6101.	nc5h11coc3h6o2-1+ho2=npecoc3h6o2h-1+o2	2.29E+11	0.0	-1790.0
6102.	npecoc3h6o2h-1=nc5h11coc3h6o-1+oh	1.50E+16	0.0	42500.0
6103.	ch2o+nc5h11coc2h4p=nc5h11coc3h6o-1	1.50E+11	0.0	11900.0
6104.	ch3coc5h9-1+oh=ch2coc5h9-1+h2o	5.10E+11	0.0	1192.0
6105.	ch3coc5h9-1+ho2=ch2coc5h9-1+h2o2	2.38E+04	2.5	14690.0
6106.	ch3coc5h9-1+h=ch2coc5h9-1+h2	9.30E+12	0.0	6357.0
6107.	ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-15+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6108.	ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-15+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6109.	ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-15+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6110.	ch3coc5h9-1+oh=ch3coc5h8-13+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
6111.	ch3coc5h9-1+ho2=ch3coc5h8-13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
6112.	ch3coc5h9-1+h=ch3coc5h8-13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
6113.	ch2co+Ec5h9-1=ch2coc5h9-1	3.33E+10	0.0	6397.0
6114.	mvk+ac3h5=ch3coc5h8-15	8.80E+03	2.5	6130.0
6115.	c4h6+ch2cooch3=ch3coc5h8-13	1.32E+04	2.5	6130.0
6116.	c2h5coc5h9-1+oh=sc2h4coc5h9-1+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6117.	c2h5coc5h9-1+ho2=sc2h4coc5h9-1+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6118.	c2h5coc5h9-1+h=sc2h4coc5h9-1+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6119.	c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-15+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6120.	c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-15+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6121.	c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-15+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6122.	c2h5coc5h9-1+oh=c2h5coc5h8-13+h2o	4.19E+06	2.0	-543.0
6123.	c2h5coc5h9-1+ho2=c2h5coc5h8-13+h2o2	1.00E+11	0.0	17060.0
6124.	c2h5coc5h9-1+h=c2h5coc5h8-13+h2	6.55E+12	0.0	4445.0
6125.	ch3chco+Ec5h9-1=sc2h4coc5h9-1	3.33E+10	0.0	6397.0
6126.	c2h5coc2h3+ac3h5=c2h5coc5h8-15	8.80E+03	2.5	6130.0
6127.	c4h6+c2h5cooch2=c2h5coc5h8-13	1.32E+04	2.5	6130.0
6128.	c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-3+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6129.	c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-3+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6130.	c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-3+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6131.	c2h3coc3h7+oh=c2h3coc3h6-2+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0
6132.	c2h3coc3h7+ho2=c2h3coc3h6-2+h2o2	5.60E+12	0.0	17700.0
6133.	c2h3coc3h7+h=c2h3coc3h6-2+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
6134.	divinket+ch3=c2h3coc3h6-3	1.32E+04	2.5	6130.0
6135.	c3h6+c2h3co=c2h3coc3h6-2	1.00E+11	0.0	7800.0
6136.	c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-4+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6137.	c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-4+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6138.	c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-4+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6139.	c2h3coc4h9+oh=c2h3coc4h8-3+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0
6140.	c2h3coc4h9+ho2=c2h3coc4h8-3+h2o2	5.60E+12	0.0	17700.0
6141.	c2h3coc4h9+h=c2h3coc4h8-3+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
6142.	divinket+c2h5=c2h3coc4h8-4	1.32E+04	2.5	6130.0
6143.	c4h8+c2h3co=c2h3coc4h8-3	1.00E+11	0.0	7800.0
6144.	c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-5+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6145.	c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-5+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6146.	c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-5+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6147.	c2h3coc5h11+oh=c2h3coc5h10-4+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0
6148.	c2h3coc5h11+ho2=c2h3coc5h10-4+h2o2	5.60E+12	0.0	17700.0
6149.	c2h3coc5h11+h=c2h3coc5h10-4+h2	1.30E+06	2.4	4471.0
6150.	divinket+nc3h7=c2h3coc5h10-5	1.32E+04	2.5	6130.0
6151.	c5h10+c2h3co=c2h3coc5h10-4	1.00E+11	0.0	7800.0
6152.	c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-6+h2o	8.45E+11	0.0	-228.0
6153.	c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-6+h2o2	2.00E+11	0.0	8698.0
6154.	c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-6+h2	4.46E+06	2.0	3200.0
6155.	c2h3coc6h13+oh=c2h3coc6h12-5+h2o	3.16E+07	1.6	-247.0
6156.	c2h3coc6h13+ho2=c2h3coc6h12-5+h2o2	5.60E+12	0.0	17700.0
6157.	c2h3coc6h13+h=c2h3coc6h12-5+h2	1.30E+06	2.4	4471.0

6158. divinket+pc4h9=c2h3coc6h12-6 1.32E+04 2.5 6130.0
6159. c6h12-1+c2h3co=c2h3coc6h12-5 1.00E+11 0.0 7800.0
6160. ch3chco+oh=c2h5+co2 1.73E+12 0.0 -1010.0
6161. ch3chco+oh=ch3choh+co 2.00E+12 0.0 -1010.0
6162. ch3chco+h=c2h5+co 4.40E+12 0.0 1459.0
6163. ch3chco+o=ch3hco+co 3.20E+12 0.0 -437.0
6164. nc11h24=Ac6h13+Ac5h11 5.77E+20 -1.1 87265.0
6165. nc11h24=pc4h9+Ac7h15 3.97E+22 -1.6 87867.0
6166. nc11h24=nc3h7+Ac8h17 3.14E+25 -2.4 86262.0
6167. nc11h24=c2h5+Ac9h19 1.45E+26 -2.6 85338.0
6168. nc11h24=ch3+Ac10h21 1.60E+22 -1.6 89651.0
6169. nc11h24=h+Ac11h23 1.10E+14 0.8 96940.0
6170. nc11h24=h+Bc11h23 3.41E+15 0.3 97203.0
6171. nc11h24=h+Cc11h23 3.75E+15 0.3 97191.0
6172. nc11h24=h+Dc11h23 3.75E+15 0.3 97191.0
6173. nc11h24=h+Ec11h23 3.75E+15 0.3 97191.0
6174. nc11h24=h+Fc11h23 1.88E+15 0.3 97191.0
6175. nc11h24+o2=ho2+Ac11h23 4.00E+13 0.0 50870.0
6176. nc11h24+o2=ho2+Bc11h23 8.00E+13 0.0 47690.0
6177. nc11h24+o2=ho2+Cc11h23 8.00E+13 0.0 47690.0
6178. nc11h24+o2=ho2+Dc11h23 8.00E+13 0.0 47690.0
6179. nc11h24+o2=ho2+Ec11h23 8.00E+13 0.0 47690.0
6180. nc11h24+o2=ho2+Fc11h23 4.00E+13 0.0 47690.0
6181. nc11h24+oh=h2o+Ac11h23 1.05E+10 1.0 1590.0
6182. nc11h24+oh=h2o+Bc11h23 9.36E+07 1.6 -35.0
6183. nc11h24+oh=h2o+Cc11h23 9.36E+07 1.6 -35.0
6184. nc11h24+oh=h2o+Dc11h23 9.36E+07 1.6 -35.0
6185. nc11h24+oh=h2o+Ec11h23 9.36E+07 1.6 -35.0
6186. nc11h24+oh=h2o+Fc11h23 4.68E+07 1.6 -35.0
6187. nc11h24+ho2=h2o2+Ac11h23 1.68E+13 0.0 20440.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.05E+13 -0.4 8399.0
6188. nc11h24+ho2=h2o2+Bc11h23 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
6189. nc11h24+ho2=h2o2+Cc11h23 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
6190. nc11h24+ho2=h2o2+Dc11h23 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
6191. nc11h24+ho2=h2o2+Ec11h23 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
6192. nc11h24+ho2=h2o2+Fc11h23 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
6193. nc11h24+h=h2+Ac11h23 1.88E+05 2.8 6280.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.93E+03 2.7 10550.0
6194. nc11h24+h=h2+Bc11h23 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
6195. nc11h24+h=h2+Cc11h23 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
6196. nc11h24+h=h2+Dc11h23 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
6197. nc11h24+h=h2+Ec11h23 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
6198. nc11h24+h=h2+Fc11h23 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
6199. o+nc11h24=oh+Ac11h23 1.93E+05 2.7 3716.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.02E+03 2.6 5893.0
6200. o+nc11h24=oh+Bc11h23 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
6201. o+nc11h24=oh+Cc11h23 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
6202. o+nc11h24=oh+Dc11h23 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
6203. o+nc11h24=oh+Ec11h23 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
6204. o+nc11h24=oh+Fc11h23 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
6205. nc11h24+ch3=ch4+Ac11h23 9.04E-01 3.6 7154.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.12E+00 3.6 11910.0
6206. nc11h24+ch3=ch4+Bc11h23 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
6207. nc11h24+ch3=ch4+Cc11h23 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
6208. nc11h24+ch3=ch4+Dc11h23 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
6209. nc11h24+ch3=ch4+Ec11h23 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
6210. nc11h24+ch3=ch4+Fc11h23 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
6211. nc11h24+c2h5=c2h6+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6212. nc11h24+c2h5=c2h6+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6213. nc11h24+c2h5=c2h6+Cc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6214. nc11h24+c2h5=c2h6+Dc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6215. nc11h24+c2h5=c2h6+Ec11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6216. nc11h24+c2h5=c2h6+Fc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6217. nc11h24+hco=ch2o+Ac11h23 2.00E+05 2.5 18500.0
6218. nc11h24+hco=ch2o+Bc11h23 2.20E+07 1.9 17000.0
6219. nc11h24+hco=ch2o+Cc11h23 2.20E+07 1.9 17000.0
6220. nc11h24+hco=ch2o+Dc11h23 2.20E+07 1.9 17000.0
6221. nc11h24+hco=ch2o+Ec11h23 2.20E+07 1.9 17000.0
6222. nc11h24+hco=ch2o+Fc11h23 1.10E+07 1.9 17000.0
6223. nc11h24+ch3o=ch3oh+Ac11h23 3.20E+11 0.0 7300.0
6224. nc11h24+ch3o=ch3oh+Bc11h23 2.90E+11 0.0 4500.0
6225. nc11h24+ch3o=ch3oh+Cc11h23 2.90E+11 0.0 4500.0
6226. nc11h24+ch3o=ch3oh+Dc11h23 2.90E+11 0.0 4500.0
6227. nc11h24+ch3o=ch3oh+Ec11h23 2.90E+11 0.0 4500.0
6228. nc11h24+ch3o=ch3oh+Fc11h23 1.45E+11 0.0 4500.0
6229. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Ac11h23 2.00E+02 3.0 14000.0
6230. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Bc11h23 1.20E+02 3.0 12000.0
6231. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Cc11h23 1.20E+02 3.0 12000.0
6232. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Dc11h23 1.20E+02 3.0 12000.0
6233. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Ec11h23 1.20E+02 3.0 12000.0
6234. nc11h24+ch2oh=ch3oh+Fc11h23 6.00E+01 3.0 12000.0
6235. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Ac11h23 1.20E+13 0.0 20000.0
6236. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Bc11h23 6.00E+12 0.0 17500.0
6237. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Cc11h23 6.00E+12 0.0 17500.0
6238. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Dc11h23 6.00E+12 0.0 17500.0
6239. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Ec11h23 6.00E+12 0.0 17500.0
6240. nc11h24+ch3o2=ch3o2h+Fc11h23 3.00E+12 0.0 17500.0
6241. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6242. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6243. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6244. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6245. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6246. nc11h24+ch2hco=ch3hco+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6247. nc11h24+ch3co=ch3hco+Ac11h23 3.00E+11 0.0 15000.0
6248. nc11h24+ch3co=ch3hco+Bc11h23 2.00E+11 0.0 12700.0
6249. nc11h24+ch3co=ch3hco+Cc11h23 2.00E+11 0.0 12700.0
6250. nc11h24+ch3co=ch3hco+Dc11h23 2.00E+11 0.0 12700.0
6251. nc11h24+ch3co=ch3hco+Ec11h23 2.00E+11 0.0 12700.0
6252. nc11h24+ch3co=ch3hco+Fc11h23 1.00E+11 0.0 12700.0
6253. nc11h24+nc3h7=c3h8+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6254. nc11h24+nc3h7=c3h8+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6255. nc11h24+nc3h7=c3h8+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6256. nc11h24+nc3h7=c3h8+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6257. nc11h24+nc3h7=c3h8+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6258. nc11h24+nc3h7=c3h8+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6259. nc11h24+pc4h9=c4h10+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6260. nc11h24+pc4h9=c4h10+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6261. nc11h24+pc4h9=c4h10+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6262. nc11h24+pc4h9=c4h10+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6263. nc11h24+pc4h9=c4h10+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6264. nc11h24+pc4h9=c4h10+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6265. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6266. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6267. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6268. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6269. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6270. nc11h24+Ac5h11=nc5h12+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6271. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6272. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6273. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6274. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6275. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6276. nc11h24+Ac6h13=c6h14+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6277. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6278. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6279. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6280. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6281. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6282. nc11h24+Ac7h15=nc7h16+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6283. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6284. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6285. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6286. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6287. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6288. nc11h24+Ac8h17=nc8h18+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6289. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6290. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6291. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6292. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6293. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6294. nc11h24+Ac9h19=nc9h20+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6295. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Ac11h23 6.00E+11 0.0 13700.0
6296. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6297. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6298. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6299. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6300. nc11h24+Ac10h21=nc10h22+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6301. nc11h24+Ac11h23=nc11h24+Bc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6302. nc11h24+Ac11h23=nc11h24+Cc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6303. nc11h24+Ac11h23=nc11h24+Dc11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6304. nc11h24+Ac11h23=nc11h24+Ec11h23 4.00E+11 0.0 11400.0
6305. nc11h24+Ac11h23=nc11h24+Fc11h23 2.00E+11 0.0 11400.0
6306. nc11h24+Bc11h23=nc11h24+Cc11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
6307. nc11h24+Bc11h23=nc11h24+Dc11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
6308. nc11h24+Bc11h23=nc11h24+Ec11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
6309. nc11h24+Bc11h23=nc11h24+Fc11h23 2.00E+11 0.0 12400.0
6310. nc11h24+Cc11h23=nc11h24+Dc11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
6311. nc11h24+Cc11h23=nc11h24+Ec11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
6312. nc11h24+Dc11h23=nc11h24+Ec11h23 4.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
6313. nc11h24+Dc11h23=nc11h24+Fc11h23 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
6314. nc11h24+Ec11h23=nc11h24+Fc11h23 2.00E+11 0.0 12400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.00E+11 0.0 12400.0
6315. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6316. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6317. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Cc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6318. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Dc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6319. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Ec11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6320. nc11h24+c11h23qjA=c11h23qA+Fc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6321. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qB+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6322. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qB+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6323. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qB+Cc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6324. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qB+Dc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6325. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qB+Ec11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6326. nc11h24+c11h23qjB=c11h23qA+Fc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6327. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qC+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6328. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qC+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6329. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qC+Cc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6330. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qC+Dc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6331. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qC+Ec11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6332. nc11h24+c11h23qjC=c11h23qA+Fc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6333. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qD+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6334. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qD+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6335. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qD+Cc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6336. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qD+Dc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6337. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qD+Ec11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6338. nc11h24+c11h23qjD=c11h23qA+Fc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0
6339. nc11h24+c11h23qjE=c11h23qE+Ac11h23 1.00E+11 0.0 13400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.20E+11 0.0 12300.0
6340. nc11h24+c11h23qjE=c11h23qE+Bc11h23 1.00E+11 0.0 10400.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.00E+11 0.0 12900.0

6341.	nc11h24+c11h23qjE=c11h23qE+Cc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6342.	nc11h24+c11h23qjE=c11h23qE+Dc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6343.	nc11h24+c11h23qjE=c11h23qE+Ec11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6344.	nc11h24+c11h23qjE=c11h23qA+Fc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6345.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qE+Ac11h23	1.00E+11	0.0	13400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.20E+11	0.0	12300.0
6346.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qE+Bc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6347.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qE+Cc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6348.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qE+Dc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6349.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qE+Ec11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6350.	nc11h24+c11h23qjF=c11h23qA+Fc11h23	1.00E+11	0.0	10400.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	12900.0
6351.	nc11h24+o2cho=Ac11h23+ho2cho	1.68E+13	0.0	20440.0
6352.	nc11h24+o2cho=Bc11h23+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
6353.	nc11h24+o2cho=Cc11h23+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
6354.	nc11h24+o2cho=Dc11h23+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
6355.	nc11h24+o2cho=Ec11h23+ho2cho	1.12E+13	0.0	17690.0
6356.	nc11h24+o2cho=Fc11h23+ho2cho	5.60E+12	0.0	17690.0
6357.	Ac11h23=Ac9h19+c2h4	9.12E+11	0.3	27240.5
6358.	Bc11h23=Ac8h17+c3h6	6.02E+10	0.8	27822.8
6359.	Cc11h23=Ac7h15+c4h8	2.04E+13	0.0	28496.5
6360.	Cc11h23=ch3+c10h20-1	9.55E+09	1.1	29390.7
6361.	Dc11h23=Ac6h13+c5h10	2.04E+13	0.0	28496.5
6362.	Dc11h23=c2h5+c9h18-1	8.51E+09	1.1	27025.9
6363.	Ec11h23=Ac5h11+c6h12-1	2.04E+13	0.0	28496.5
6364.	Ec11h23=nc3h7+c8h16-1	5.50E+11	0.6	28087.1
6365.	Fc11h23=pc4h9+c7h14-1	4.08E+13	0.0	28496.5
6366.	Ac11h23=h+c11h22-1	1.99E+13	0.0	35861.0
6367.	Bc11h23=h+c11h22-1	7.73E+12	0.2	36548.0
6368.	Bc11h23=h+c11h22-2	1.08E+13	0.0	35288.0
6369.	Cc11h23=h+c11h22-2	7.47E+12	0.0	35206.0
6370.	Cc11h23=h+c11h22-3	4.03E+12	0.1	35036.0
6371.	Dc11h23=h+c11h22-3	4.03E+12	0.1	35039.0
6372.	Dc11h23=h+c11h22-4	4.02E+12	0.1	35037.0
6373.	Ec11h23=h+c11h22-4	4.02E+12	0.1	35037.0
6374.	Ec11h23=h+c11h22-5	2.19E+12	0.1	35055.0
6375.	Fc11h23=h+c11h22-5	2.19E+12	0.1	35055.0
6376.	Ac11h23+o2=c11h22-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6377.	Bc11h23+o2=c11h22-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6378.	Bc11h23+o2=c11h22-2+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6379.	Cc11h23+o2=c11h22-2+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6380.	Cc11h23+o2=c11h22-3+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6381.	Dc11h23+o2=c11h22-3+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6382.	Dc11h23+o2=c11h22-4+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6383.	Ec11h23+o2=c11h22-4+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6384.	Ec11h23+o2=c11h22-5+ho2	1.90E+12	0.0	5000.0
6385.	Fc11h23+o2=c11h22-5+ho2	3.80E+12	0.0	5000.0
6386.	Ac11h23+o=ch2o+Ac10h21	2.00E+13	0.0	4000.0
6387.	Bc11h23+o=ch3hco+Ac9h19	2.00E+13	0.0	4000.0
6388.	Bc11h23+o=ch3+c9h19hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6389.	Cc11h23+o=ethco+Ac8h17	2.00E+13	0.0	4000.0
6390.	Cc11h23+o=c2h5+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6391.	Dc11h23+o=nc3h7+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6392.	Dc11h23+o=nc3h7hco+Ac7h15	2.00E+13	0.0	4000.0
6393.	Ec11h23+o=pc4h9+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6394.	Ec11h23+o=nc4h9hco+Ac6h13	2.00E+13	0.0	4000.0
6395.	Fc11h23+o=c5h11hco+Ac5h11	2.00E+13	0.0	4000.0
6396.	Ac11h23+oh=ch2o+nc10h22	2.00E+13	0.0	4000.0
6397.	Bc11h23+oh=ch3hco+nc9h20	2.00E+13	0.0	4000.0
6398.	Bc11h23+oh=ch4+c9h19hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6399.	Cc11h23+oh=ethco+nc8h18	2.00E+13	0.0	4000.0
6400.	Cc11h23+oh=c2h6+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6401.	Dc11h23+oh=c3h8+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6402.	Dc11h23+oh=nc3h7hco+nc7h16	2.00E+13	0.0	4000.0
6403.	Ec11h23+oh=c4h10+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
6404.	Ec11h23+oh=nc4h9hco+c6h14	2.00E+13	0.0	4000.0
6405.	Ec11h23+oh=c5h11hco+nc5h12	2.00E+13	0.0	4000.0
6406.	Ac11h23+ho2=ch2o+Ac10h21+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6407.	Bc11h23+ho2=ch3hco+Ac9h19+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6408.	Bc11h23+ho2=ch3+c9h19hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6409.	Cc11h23+ho2=ethco+Ac8h17+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6410.	Cc11h23+ho2=c2h5+c8h17hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6411.	Dc11h23+ho2=nc3h7+c7h15hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6412.	Dc11h23+ho2=nc3h7hco+Ac7h15+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6413.	Ec11h23+ho2=pc4h9+c6h13hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6414.	Ec11h23+ho2=nc4h9hco+Ac6h13+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6415.	Fc11h23+ho2=c5h11hco+Ac5h11+oh	5.00E+12	0.0	0.0
6416.	Ac11h23=Dc11h23	5.13E+00	3.2	16849.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.17E-01	3.6	18942.0
6417.	Ac11h23=Ec11h23	2.29E+01	2.8	10757.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.86E+00	3.2	12849.0
6418.	Ac11h23=Fc11h23	2.95E+00	3.1	11017.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.62E+00	3.1	13073.0
6419.	Bc11h23=Ec11h23	6.82E-03	3.9	10249.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.82E-03	3.9	10249.0
6420.	Bc11h23=Fc11h23	1.86E+00	3.3	13199.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.72E+00	3.3	13199.0
6421.	Cc11h23=Dc11h23	2.95E+00	3.1	11017.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.95E+00	3.1	11017.0
6422.	Cc11h23=Ec11h23	1.86E+00	3.3	13199.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.86E+00	3.3	13199.0
6423.	Cc11h23=Fc11h23	1.41E+00	3.3	16146.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.82E+00	3.3	16146.0
6424.	Dc11h23=Ec11h23	1.41E+00	3.3	16146.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.41E+00	3.3	16146.0
6425.	Ac11h23+o2=c11h23qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
6426.	Bc11h23+o2=c11h23qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
6427.	Cc11h23+o2=c11h23qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
6428.	Dc11h23+o2=c11h23qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
6429.	Ec11h23+o2=c11h23qjE	1.80E+19	-2.5	0.0
6430.	Fc11h23+o2=c11h23qjF	1.80E+19	-2.5	0.0
6431.	Ac11h23+ho2=c11h23ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6432.	Bc11h23+ho2=c11h23ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6433.	Cc11h23+ho2=c11h23ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6434.	Dc11h23+ho2=c11h23ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6435.	Ec11h23+ho2=c11h23ojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6436.	Fc11h23+ho2=c11h23ojF+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
6437.	Ac11h23+ch3o2=c11h23ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6438.	Bc11h23+ch3o2=c11h23ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6439.	Cc11h23+ch3o2=c11h23ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6440.	Dc11h23+ch3o2=c11h23ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6441.	Ec11h23+ch3o2=c11h23ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6442.	Fc11h23+ch3o2=c11h23ojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6443.	Ac11h23+c2h5o2=c11h23ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6444.	Bc11h23+c2h5o2=c11h23ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6445.	Cc11h23+c2h5o2=c11h23ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6446.	Dc11h23+c2h5o2=c11h23ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6447.	Ec11h23+c2h5o2=c11h23ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6448.	Fc11h23+c2h5o2=c11h23ojF+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6449.	Ac11h23+nc3h7o2=c11h23ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6450.	Bc11h23+nc3h7o2=c11h23ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6451.	Cc11h23+nc3h7o2=c11h23ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6452.	Dc11h23+nc3h7o2=c11h23ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6453.	Ec11h23+nc3h7o2=c11h23ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6454.	Fc11h23+nc3h7o2=c11h23ojF+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6455.	Ac11h23+ic3h7o2=c11h23ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6456.	Bc11h23+ic3h7o2=c11h23ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6457.	Cc11h23+ic3h7o2=c11h23ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6458.	Dc11h23+ic3h7o2=c11h23ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6459.	Ec11h23+ic3h7o2=c11h23ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6460.	Fc11h23+ic3h7o2=c11h23ojF+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
6461.	Ac11h23+c11h23qjA=2c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6462.	Bc11h23+c11h23qjA=c11h23ojB+c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6463.	Cc11h23+c11h23qjA=c11h23ojC+c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6464.	Dc11h23+c11h23qjA=c11h23ojD+c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6465.	Ec11h23+c11h23qjA=c11h23ojE+c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6466.	Fc11h23+c11h23qjA=c11h23ojF+c11h23ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
6467.	Ac11h23+c11h23qjB=c11h23ojA+c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6468.	Bc11h23+c11h23qjB=2c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6469.	Cc11h23+c11h23qjB=c11h23ojC+c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6470.	Dc11h23+c11h23qjB=c11h23ojD+c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6471.	Ec11h23+c11h23qjB=c11h23ojE+c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6472.	Fc11h23+c11h23qjB=c11h23ojF+c11h23ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
6473.	Ac11h23+c11h23qjC=c11h23ojA+c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6474.	Bc11h23+c11h23qjC=c11h23ojB+c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6475.	Cc11h23+c11h23qjC=2c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6476.	Dc11h23+c11h23qjC=c11h23ojD+c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6477.	Ec11h23+c11h23qjC=c11h23ojE+c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6478.	Fc11h23+c11h23qjC=c11h23ojF+c11h23ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
6479.	Ac11h23+c11h23qjD=c11h23ojA+c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6480.	Bc11h23+c11h23qjD=c11h23ojB+c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6481.	Cc11h23+c11h23qjD=c11h23ojC+c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6482.	Dc11h23+c11h23qjD=2c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6483.	Ec11h23+c11h23qjD=c11h23ojE+c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6484.	Fc11h23+c11h23qjD=c11h23ojF+c11h23ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
6485.	Ac11h23+c11h23qjE=c11h23ojA+c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6486.	Bc11h23+c11h23qjE=c11h23ojB+c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6487.	Cc11h23+c11h23qjE=c11h23ojC+c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6488.	Dc11h23+c11h23qjE=c11h23ojD+c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6489.	Ec11h23+c11h23qjE=2c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6490.	Fc11h23+c11h23qjE=c11h23ojF+c11h23ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
6491.	Ac11h23+c11h23qjF=c11h23ojA+c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6492.	Bc11h23+c11h23qjF=c11h23ojB+c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6493.	Cc11h23+c11h23qjF=c11h23ojC+c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6494.	Dc11h23+c11h23qjF=c11h23ojD+c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6495.	Ec11h23+c11h23qjF=c11h23ojE+c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6496.	Fc11h23+c11h23qjF=2c11h23ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
6497.	c11h23ojA=ch2o+Ac10h21	2.10E+22	-2.6	12941.0
6498.	c11h23ojB=ch3hco+Ac9h19	8.42E+09	1.2	9888.0
6499.	c11h23ojB=ch3+c9h19hco	5.28E+09	1.2	13999.0
6500.	c11h23ojC=ethco+Ac8h17	1.90E+10	1.1	9825.0
6501.	c11h23ojC=c2h5+c8h17hco	3.89E+12	0.5	9071.0
6502.	c11h23ojD=nc3h7+c7h15hco	1.22E+12	0.6	10063.0
6503.	c11h23ojD=nc3h7hco+Ac7h15	5.67E+13	0.2	10812.0
6504.	c11h23ojE=pc4h9+c6h13hco	2.60E+14	-0.1	11248.5
6505.	c11h23ojE=nc4h9hco+Ac6h13	8.89E+11	0.6	10405.0
6506.	c11h23ojE=c5h11hco+Ac5h11	8.89E+11	0.6	10405.0
6507.	c11h23qA=oh+c11h23ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
6508.	c11h23qB=oh+c11h23ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
6509.	c11h23qC=oh+c11h23ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
6510.	c11h23qD=oh+c11h23ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
6511.	c11h23qE=oh+c11h23ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
6512.	c11h23qjA=c11h22rBqA	5.70E+08	1.0	32500.0
6513.	c11h23qjA=c11h22rCqA	9.90E+07	1.0	25000.0
6514.	c11h23qjA=c11h22rDqA	1.70E+07	1.0	22000.0
6515.	c11h23qjA=c11h22rEqA	2.90E+06	1.0	21000.0
6516.	c11h23qjB=c11h22rAqB	8.65E+08	1.0	35500.0
6517.	c11h23qjB=c11h22rCqB	5.70E+08	1.0	32500.0
6518.	c11h23qjB=c11h22rDqB	9.90E+07	1.0	25000.0
6519.	c11h23qjB=c11h22rEqB	1.70E+07	1.0	22000.0
6520.	c11h23qjB=c11h22rFqB	2.90E+06	1.0	21000.0
6521.	c11h23qjC=c11h22rAqC	1.48E+08	1.0	28000.0
6522.	c11h23qjC=c11h22rBqC	5.70E+08	1.0	32500.0
6523.	c11h23qjC=c11h22rDqC	5.70E+08	1.0	32500.0
6524.	c11h23qjC=c11h22rEqC	9.90E+07	1.0	25000.0
6525.	c11h23qjC=c11h22rFqC	1.70E+07	1.0	22000.0
6526.	c11h23qjC=c11h22rGqC	2.90E+06	1.0	21000.0
6527.	c11h23qjD=c11h22rAqD	2.53E+07	1.0	25000.0
6528.	c11h23qjD=c11h22rBqD	9.90E+07	1.0	25000.0
6529.	c11h23qjD=c11h22rCqD	5.70E+08	1.0	32500.0
6530.	c11h23qjD=c11h22rEqD	5.70E+08	1.0	32500.0
6531.	c11h23qjD=c11h22rFqD	9.90E+07	1.0	25000.0
6532.	c11h23qjD=c11h22rGqD	1.70E+07	1.0	22000.0
6533.	c11h23qjD=c11h22rHqD	2.90E+06	1.0	21000.0
6534.	c11h23qjE=c11h22rAqE	4.35E+06	1.0	24000.0
6535.	c11h23qjE=c11h22rBqE	1.70E+07	1.0	22000.0
6536.	c11h23qjE=c11h22rCqE	9.90E+07	1.0	25000.0
6537.	c11h23qjE=c11h22rDqE	5.70E+08	1.0	32500.0
6538.	c11h23qjE=c11h22rFqE	5.70E+08	1.0	32500.0
6539.	c11h23qjE=c11h22rGqE	9.90E+07	1.0	25000.0
6540.	c11h23qjE=c11h22rHqE	1.70E+07	1.0	22000.0
6541.	c11h23qjE=c11h22rIqE	2.90E+06	1.0	21000.0
6542.	c11h23qjF=c11h22rBqF	5.80E+06	1.0	21000.0
6543.	c11h23qjF=c11h22rCqF	3.40E+07	1.0	22000.0
6544.	c11h23qjF=c11h22rDqF	1.98E+08	1.0	25000.0
6545.	c11h23qjF=c11h22rEqF	1.14E+09	1.0	32500.0
6546.	c11h23qjA+ho2=c11h23qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6547.	c11h23qjB+ho2=c11h23qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6548.	c11h23qjC+ho2=c11h23qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6549.	c11h23qjD+ho2=c11h23qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6550.	c11h23qjE+ho2=c11h23qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6551.	c11h23qjF+ho2=c11h23qF+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
6552.	c11h23qjA+h2o2=c11h23qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6553.	c11h23qjB+h2o2=c11h23qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6554.	c11h23qjC+h2o2=c11h23qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6555.	c11h23qjD+h2o2=c11h23qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6556.	c11h23qjE+h2o2=c11h23qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6557.	c11h23qjF+h2o2=c11h23qF+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
6558.	c11h23qjA+ho2=c11h23ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6559.	c11h23qjB+ho2=c11h23ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6560.	c11h23qjC+ho2=c11h23ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6561.	c11h23qjD+ho2=c11h23ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6562.	c11h23qjE+ho2=c11h23ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6563.	c11h23qjF+ho2=c11h23ojF+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
6564.	c11h23qjA+ch3o2=c11h23ojA+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0
6565.	c11h23qjB+ch3o2=c11h23ojB+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860.0

6566. c11h23qjC+ch3o2=c11h23ojC+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6567. c11h23qjD+ch3o2=c11h23ojD+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6568. c11h23qjE+ch3o2=c11h23ojE+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6569. c11h23qjF+ch3o2=c11h23ojF+ch3o+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6570. c11h23qjA+c11h23qjA=c11h23ojA+c11h23ojA+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6571. c11h23qjA+c11h23qjB=c11h23ojA+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6572. c11h23qjA+c11h23qjC=c11h23ojA+c11h23ojC+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6573. c11h23qjA+c11h23qjD=c11h23ojA+c11h23ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6574. c11h23qjA+c11h23qjE=c11h23ojA+c11h23ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6575. c11h23qjA+c11h23qjF=c11h23ojA+c11h23ojF+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6576. c11h23qjB+c11h23qjB=c11h23ojB+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6577. c11h23qjB+c11h23qjC=c11h23ojC+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6578. c11h23qjB+c11h23qjD=c11h23ojD+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6579. c11h23qjB+c11h23qjE=c11h23ojE+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6580. c11h23qjB+c11h23qjF=c11h23ojF+c11h23ojB+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6581. c11h23qjC+c11h23qjC=c11h23ojC+c11h23ojC+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6582. c11h23qjC+c11h23qjD=c11h23ojC+c11h23ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6583. c11h23qjC+c11h23qjE=c11h23ojC+c11h23ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6584. c11h23qjC+c11h23qjF=c11h23ojC+c11h23ojF+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6585. c11h23qjD+c11h23qjD=c11h23ojD+c11h23ojD+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6586. c11h23qjD+c11h23qjE=c11h23ojD+c11h23ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6587. c11h23qjD+c11h23qjF=c11h23ojD+c11h23ojF+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6588. c11h23qjE+c11h23qjE=c11h23ojE+c11h23ojE+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6589. c11h23qjE+c11h23qjF=c11h23ojE+c11h23ojF+o2 1.40E+16 -1.6 1860.0
6590. c11h22rBqA+o2=c11h22qjBqA 1.70E+19 -2.5 0.0
6591. c11h22rCqA+o2=c11h22qjCqA 1.80E+19 -2.5 0.0
6592. c11h22rDqA+o2=c11h22qjDqA 1.80E+19 -2.5 0.0
6593. c11h22rEqA+o2=c11h22qjEqA 1.80E+19 -2.5 0.0
6594. c11h22rAqB+o2=c11h22qjAqB 9.00E+18 -2.5 0.0
6595. c11h22rCqB+o2=c11h22qjCqB 1.80E+19 -2.5 0.0
6596. c11h22rDqB+o2=c11h22qjDqB 1.80E+19 -2.5 0.0
6597. c11h22rEqB+o2=c11h22qjEqB 1.80E+19 -2.5 0.0
6598. c11h22rFqB+o2=c11h22qjFqB 1.80E+19 -2.5 0.0
6599. c11h22rAqC+o2=c11h22qjAqC 9.00E+18 -2.5 0.0
6600. c11h22rBqC+o2=c11h22qjBqC 1.70E+19 -2.5 0.0
6601. c11h22rDqC+o2=c11h22qjDqC 1.80E+19 -2.5 0.0
6602. c11h22rEqC+o2=c11h22qjEqC 1.80E+19 -2.5 0.0
6603. c11h22rFqC+o2=c11h22qjFqC 1.80E+19 -2.5 0.0
6604. c11h22rGqC+o2=c11h22qjGqC 1.80E+19 -2.5 0.0
6605. c11h22rAqD+o2=c11h22qjAqD 9.00E+18 -2.5 0.0
6606. c11h22rBqD+o2=c11h22qjBqD 1.70E+19 -2.5 0.0
6607. c11h22rCqD+o2=c11h22qjCqD 1.80E+19 -2.5 0.0
6608. c11h22rEqD+o2=c11h22qjEqD 1.80E+19 -2.5 0.0
6609. c11h22rFqD+o2=c11h22qjFqD 1.80E+19 -2.5 0.0
6610. c11h22rGqD+o2=c11h22qjGqD 1.80E+19 -2.5 0.0
6611. c11h22rHqD+o2=c11h22qjHqD 1.80E+19 -2.5 0.0
6612. c11h22rAqE+o2=c11h22qjAqE 9.00E+18 -2.5 0.0
6613. c11h22rBqE+o2=c11h22qjBqE 1.70E+19 -2.5 0.0
6614. c11h22rCqE+o2=c11h22qjCqE 1.80E+19 -2.5 0.0
6615. c11h22rDqE+o2=c11h22qjDqE 1.80E+19 -2.5 0.0
6616. c11h22rFqE+o2=c11h22qjFqE 1.80E+19 -2.5 0.0
6617. c11h22rGqE+o2=c11h22qjGqE 1.80E+19 -2.5 0.0
6618. c11h22rHqE+o2=c11h22qjHqE 1.80E+19 -2.5 0.0
6619. c11h22rIqE+o2=c11h22qjIqE 1.70E+19 -2.5 0.0
6620. c11h22rBqF+o2=c11h22qjBqF 1.70E+19 -2.5 0.0
6621. c11h22rCqF+o2=c11h22qjCqF 1.80E+19 -2.5 0.0
6622. c11h22rDqF+o2=c11h22qjDqF 1.80E+19 -2.5 0.0
6623. c11h22rEqF+o2=c11h22qjEqF 1.80E+19 -2.5 0.0
6624. c11h22rCqA=oh+ch2o+c10h20-1 3.67E+12 0.5 28377.0
6625. c11h22rDqB=oh+ch3hco+c9h18-1 1.27E+18 -1.1 29189.0
6626. c11h22rAqC=oh+c8h17hco+c2h4 6.38E+15 -0.5 28717.0

6627. c11h22rEqC=oh+ethco+c8h16-1 5.46E+17 -1.0 28585.0
6628. c11h22rBqD=oh+c7h15hco+c3h6 1.24E+15 -0.2 27943.0
6629. c11h22rFqD=oh+nc3h7hco+c7h14-1 1.30E+17 -0.8 28398.0
6630. c11h22rCqE=oh+c6h13hco+c4h8 8.47E+15 -0.4 28015.0
6631. c11h22rGqE=oh+nc4h9hco+c6h12-1 4.49E+16 -0.7 28240.0
6632. c11h22rBqA=oh+c11h22o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
6633. c11h22rCqA=oh+c11h22o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
6634. c11h22rDqA=oh+c11h22o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
6635. c11h22rEqA=oh+c11h22o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
6636. c11h22rAqB=oh+c11h22o-AB 1.38E+12 0.0 15900.0
6637. c11h22rCqB=oh+c11h22o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
6638. c11h22rDqB=oh+c11h22o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
6639. c11h22rEqB=oh+c11h22o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
6640. c11h22rFqB=oh+c11h22o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
6641. c11h22rAqC=oh+c11h22o-AC 2.04E+11 0.0 19500.0
6642. c11h22rBqC=oh+c11h22o-BC 1.38E+12 0.0 15900.0
6643. c11h22rDqC=oh+c11h22o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
6644. c11h22rEqC=oh+c11h22o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
6645. c11h22rFqC=oh+c11h22o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
6646. c11h22rGqC=oh+c11h22o-CG 1.70E+08 0.0 1950.0
6647. c11h22rAqD=oh+c11h22o-AD 3.63E+10 0.0 13000.0
6648. c11h22rBqD=oh+c11h22o-BD 2.04E+11 0.0 19500.0
6649. c11h22rCqD=oh+c11h22o-CD 1.38E+12 0.0 15900.0
6650. c11h22rEqD=oh+c11h22o-DE 1.38E+12 0.0 15900.0
6651. c11h22rFqD=oh+c11h22o-DF 2.04E+11 0.0 19500.0
6652. c11h22rGqD=oh+c11h22o-DG 3.63E+10 0.0 13000.0
6653. c11h22rHqD=oh+c11h22o-CG 1.70E+08 0.0 1950.0
6654. c11h22rAqE=oh+c11h22o-AE 1.70E+08 0.0 1950.0
6655. c11h22rBqE=oh+c11h22o-BE 3.63E+10 0.0 13000.0
6656. c11h22rCqE=oh+c11h22o-CE 2.04E+11 0.0 19500.0
6657. c11h22rDqE=oh+c11h22o-DE 2.95E+11 0.0 22000.0
6658. c11h22rFqE=oh+c11h22o-EF 2.95E+11 0.0 22000.0
6659. c11h22rGqE=oh+c11h22o-DF 3.63E+10 0.0 13000.0
6660. c11h22rHqE=oh+c11h22o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
6661. c11h22rIqE=oh+c11h22o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
6662. c11h22rBqF=oh+c11h22o-BF 1.70E+08 0.0 1950.0
6663. c11h22rCqF=oh+c11h22o-CF 3.63E+10 0.0 13000.0
6664. c11h22rDqF=oh+c11h22o-DF 3.63E+10 0.0 13000.0
6665. c11h22rEqF=oh+c11h22o-EF 2.95E+11 0.0 22000.0
6666. ho2+c11h22-1=c11h22rAqB 1.50E+11 0.0 7800.0
6667. ho2+c11h22-1=c11h22rBqA 1.50E+11 0.0 7800.0
6668. ho2+c11h22-2=c11h22rBqC 1.50E+11 0.0 7800.0
6669. ho2+c11h22-2=c11h22rCqB 1.50E+11 0.0 7800.0
6670. ho2+c11h22-3=c11h22rCqD 1.50E+11 0.0 7800.0
6671. ho2+c11h22-3=c11h22rDqC 1.50E+11 0.0 7800.0
6672. ho2+c11h22-4=c11h22rDqE 1.50E+11 0.0 7800.0
6673. ho2+c11h22-4=c11h22rEqD 1.50E+11 0.0 7800.0
6674. ho2+c11h22-5=c11h22rFqE 1.50E+11 0.0 7800.0
6675. ho2+c11h22-5=c11h22rEqF 1.50E+11 0.0 7800.0
6676. c11h22qjBqA=oh+c11h21oAqB 3.35E+09 1.0 35500.0
6677. c11h22qjCqA=oh+c11h21oAqC 5.75E+08 1.0 28000.0
6678. c11h22qjDqA=oh+c11h21oAqD 9.89E+07 1.0 25000.0
6679. c11h22qjEqA=oh+c11h21oAqE 1.70E+07 1.0 24000.0
6680. c11h22qjAqB=oh+c11h21oBqA 1.68E+09 1.0 32500.0
6681. c11h22qjCqB=oh+c11h21oBqC 1.68E+09 1.0 32500.0
6682. c11h22qjDqB=oh+c11h21oBqD 2.88E+08 1.0 25000.0
6683. c11h22qjEqB=oh+c11h21oBqE 4.94E+07 1.0 22000.0
6684. c11h22qjFqB=oh+c11h21oBqF 8.50E+06 1.0 21000.0
6685. c11h22qjAqC=oh+c11h21oCqA 2.88E+08 1.0 25000.0
6686. c11h22qjBqC=oh+c11h21oCqB 1.68E+09 1.0 32500.0
6687. c11h22qjDqC=oh+c11h21oCqD 1.68E+09 1.0 32500.0

6688. c11h22qjEqC=oh+c11h21oCqE 2.88E+08 1.0 25000.0
6689. c11h22qjFqC=oh+c11h21oCqF 4.94E+07 1.0 22000.0
6690. c11h22qjGqC=oh+c11h21oCqG 8.50E+06 1.0 21000.0
6691. c11h22qjAqD=oh+c11h21oDqA 4.94E+07 1.0 22000.0
6692. c11h22qjBqD=oh+c11h21oDqB 2.88E+08 1.0 25000.0
6693. c11h22qjCqD=oh+c11h21oDqC 1.68E+09 1.0 32500.0
6694. c11h22qjEqD=oh+c11h21oDqE 1.68E+09 1.0 32500.0
6695. c11h22qjFqD=oh+c11h21oDqF 2.88E+08 1.0 25000.0
6696. c11h22qjGqD=oh+c11h21oDqG 4.94E+07 1.0 22000.0
6697. c11h22qjHqD=oh+c11h21oDqH 8.50E+06 1.0 21000.0
6698. c11h22qjAqE=oh+c11h21oEqA 8.50E+06 1.0 21000.0
6699. c11h22qjBqE=oh+c11h21oEqB 4.94E+07 1.0 22000.0
6700. c11h22qjCqE=oh+c11h21oEqC 2.88E+08 1.0 25000.0
6701. c11h22qjDqE=oh+c11h21oEqD 1.68E+09 1.0 32500.0
6702. c11h22qjFqE=oh+c11h21oEqF 1.68E+09 1.0 32500.0
6703. c11h22qjGqE=oh+c11h21oEqG 2.88E+08 1.0 25000.0
6704. c11h22qjHqE=oh+c11h21oEqH 4.94E+07 1.0 22000.0
6705. c11h22qjIqE=oh+c11h21oEqI 8.50E+06 1.0 21000.0
6706. c11h22qjBqF=oh+c11h21oFqB 8.50E+06 1.0 21000.0
6707. c11h22qjCqF=oh+c11h21oFqC 4.94E+07 1.0 22000.0
6708. c11h22qjDqF=oh+c11h21oFqD 2.88E+08 1.0 25000.0
6709. c11h22qjEqF=oh+c11h21oFqE 1.68E+09 1.0 32500.0
6710. c11h21oAqB=oh+hco+c9h19hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6711. c11h21oAqC=oh+ch2hco+c8h17hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6712. c11h21oAqD=oh+ch2ch2hco+c7h15hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6713. c11h21oAqE=oh+c3h6cho-1+c6h13hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6714. c11h21oBqA=oh+ch2o+c9h19co 1.50E+16 0.0 44500.0
6715. c11h21oBqC=oh+ch3co+c8h17hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6716. c11h21oBqD=oh+ch2coch3+c7h15hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6717. c11h21oBqE=oh+ch3coc2h4p+c6h13hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6718. c11h21oBqF=oh+c3h6coch3-1+c5h11hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6719. c11h21oCqA=oh+ch2o+nc8h17coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6720. c11h21oCqB=oh+ch3hco+c8h17co 1.50E+16 0.0 44500.0
6721. c11h21oCqD=oh+c2h5co+c7h15hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6722. c11h21oCqE=oh+c2h5coch2+c6h13hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6723. c11h21oCqF=oh+c2h5coc2h4p+c5h11hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6724. c11h21oCqG=oh+c2h5coc3h6-1+nc4h9hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6725. c11h21oDqA=oh+ch2o+nc7h15coc2h4p 1.50E+16 0.0 44500.0
6726. c11h21oDqB=oh+ch3hco+nc7h15coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6727. c11h21oDqC=oh+ethco+c7h15co 1.50E+16 0.0 44500.0
6728. c11h21oDqE=oh+c3h7co+c6h13hco 1.50E+16 0.0 44500.0
6729. c11h21oDqF=oh+c5h11hco+nc3h7coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6730. c11h21oDqG=oh+nc4h9hco+nc3h7coc2h4p 1.50E+16 0.0 44500.0
6731. c11h21oDqH=oh+nc3h7hco+nc3h7coc3h6-1 1.50E+16 0.0 44500.0
6732. c11h21oEqA=oh+ch2o+nc6h13coc3h6-1 1.50E+16 0.0 44500.0
6733. c11h21oEqB=oh+ch3hco+nc6h13coc2h4p 1.50E+16 0.0 44500.0
6734. c11h21oEqC=oh+ethco+nc6h16coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6735. c11h21oEqD=oh+nc3h7hco+c6h13co 1.50E+16 0.0 44500.0
6736. c11h21oEqF=oh+c5h11hco+nc4h9co 1.50E+16 0.0 44500.0
6737. c11h21oEqG=oh+nc4h9hco+nc4h9coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6738. c11h21oEqH=oh+nc3h7hco+nc4h9coc2h4p 1.50E+16 0.0 44500.0
6739. c11h21oEqI=oh+ethco+nc4h9coc3h6-1 1.50E+16 0.0 44500.0
6740. c11h21oFqB=oh+ch3hco+nc5h11coc3h6-1 1.50E+16 0.0 44500.0
6741. c11h21oFqC=oh+ethco+nc5h11coc2h4p 1.50E+16 0.0 44500.0
6742. c11h21oFqD=oh+nc3h7hco+nc5h11coch2 1.50E+16 0.0 44500.0
6743. c11h21oFqE=oh+nc4h9hco+c5h11co 1.50E+16 0.0 44500.0
6744. c11h22o-AB+h=>h2+acrol+Ac8h17 4.80E+08 1.5 2785.0
6745. c11h22o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac8h17 2.40E+06 2.0 -1192.0
6746. c11h22o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac8h17 2.50E+04 2.5 11605.0
6747. c11h22o-AB+h=>h2+ch2co+Ac9h19 2.40E+08 1.5 2005.0
6748. c11h22o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac9h19 1.20E+06 2.0 -1192.0

6749. c11h22o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac9h19 1.00E+04 2.5 9400.0
6750. c11h22o-BC+h=>h2+mvk+Ac7h15 2.40E+08 1.5 2005.0
6751. c11h22o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac7h15 1.20E+06 2.0 -1192.0
6752. c11h22o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac7h15 1.00E+04 2.5 9400.0
6753. c11h22o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac8h17 2.40E+08 1.5 2005.0
6754. c11h22o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac8h17 1.20E+06 2.0 -1192.0
6755. c11h22o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac8h17 1.00E+04 2.5 9400.0
6756. c11h22o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac6h13 2.40E+08 1.5 2005.0
6757. c11h22o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac6h13 1.20E+06 2.0 -1192.0
6758. c11h22o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac6h13 1.00E+04 2.5 9400.0
6759. c11h22o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc7h15 2.40E+08 1.5 2005.0
6760. c11h22o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc7h15 1.20E+06 2.0 -1192.0
6761. c11h22o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc7h15 1.00E+04 2.5 9400.0
6762. c11h22o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+Ac5h11 2.40E+08 1.5 2005.0
6763. c11h22o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+Ac5h11 1.20E+06 2.0 -1192.0
6764. c11h22o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+Ac5h11 1.00E+04 2.5 9400.0
6765. c11h22o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc6h13 2.40E+08 1.5 2005.0
6766. c11h22o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc6h13 1.20E+06 2.0 -1192.0
6767. c11h22o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc6h13 1.00E+04 2.5 9400.0
6768. c11h22o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+pc4h9 2.40E+08 1.5 2005.0
6769. c11h22o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+pc4h9 1.20E+06 2.0 -1192.0
6770. c11h22o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+pc4h9 1.00E+04 2.5 9400.0
6771. c11h22o-EF+h=>h2+c2h3coc5h11+nc3h7 2.40E+08 1.5 2005.0
6772. c11h22o-EF+oh=>h2o+c2h3coc5h11+nc3h7 1.20E+06 2.0 -1192.0
6773. c11h22o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc5h11+nc3h7 1.00E+04 2.5 9400.0
6774. c11h22o-AC+h=>h2+c10h20-1+hco 4.80E+08 1.5 2785.0
6775. c11h22o-AC+oh=>h2o+c10h20-1+hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
6776. c11h22o-AC+ho2=>h2o2+c10h20-1+hco 2.50E+04 2.5 11605.0
6777. c11h22o-AC+h=>h2+c2h4+c8h17co 2.40E+08 1.5 2005.0
6778. c11h22o-AC+oh=>h2o+c2h4+c8h17co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6779. c11h22o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c8h17co 1.00E+04 2.5 9400.0
6780. c11h22o-BD+h=>h2+ch3co+c9h18-1 2.40E+08 1.5 2005.0
6781. c11h22o-BD+oh=>h2o+ch3co+c9h18-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
6782. c11h22o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c9h18-1 1.00E+04 2.5 9400.0
6783. c11h22o-BD+h=>h2+c3h6+c7h15co 2.40E+08 1.5 2005.0
6784. c11h22o-BD+oh=>h2o+c3h6+c7h15co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6785. c11h22o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c7h15co 1.00E+04 2.5 9400.0
6786. c11h22o-CE+h=>h2+c8h16-1+c2h5co 2.40E+08 1.5 2005.0
6787. c11h22o-CE+oh=>h2o+c8h16-1+c2h5co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6788. c11h22o-CE+ho2=>h2o2+c8h16-1+c2h5co 1.00E+04 2.5 9400.0
6789. c11h22o-CE+h=>h2+c4h8+c6h13co 2.40E+08 1.5 2005.0
6790. c11h22o-CE+oh=>h2o+c4h8+c6h13co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6791. c11h22o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c6h13co 1.00E+04 2.5 9400.0
6792. c11h22o-DF+h=>h2+c7h14-1+c3h7co 2.40E+08 1.5 2005.0
6793. c11h22o-DF+oh=>h2o+c7h14-1+c3h7co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6794. c11h22o-DF+ho2=>h2o2+c7h14-1+c3h7co 1.00E+04 2.5 9400.0
6795. c11h22o-DF+h=>h2+c5h10+c5h11co 2.40E+08 1.5 2005.0
6796. c11h22o-DF+oh=>h2o+c5h10+c5h11co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6797. c11h22o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+c5h11co 1.00E+04 2.5 9400.0
6798. c11h22o-EG+h=>h2+c6h12-1+nc4h9co 2.40E+08 1.5 2005.0
6799. c11h22o-EG+oh=>h2o+c6h12-1+nc4h9co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6800. c11h22o-EG+ho2=>h2o2+c6h12-1+nc4h9co 1.00E+04 2.5 9400.0
6801. c11h22o-EG+h=>h2+c7h14-1+c3h7co 2.40E+08 1.5 2005.0
6802. c11h22o-EG+oh=>h2o+c7h14-1+c3h7co 1.20E+06 2.0 -1192.0
6803. c11h22o-EG+ho2=>h2o2+c7h14-1+c3h7co 1.00E+04 2.5 9400.0
6804. c11h22o-AD+h=>h2+c9h18-1+ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
6805. c11h22o-AD+oh=>h2o+c9h18-1+ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
6806. c11h22o-AD+ho2=>h2o2+c9h18-1+ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
6807. c11h22o-AD+h=>h2+c2h4+nc7h15coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6808. c11h22o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc7h15coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6809. c11h22o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc7h15coch2 1.00E+04 2.5 9400.0

6810. c11h22o-BE+h=>h2+c8h16-1+ch2coch3 2.40E+08 1.5 2005.0
6811. c11h22o-BE+oh=>h2o+c8h16-1+ch2coch3 1.20E+06 2.0 -1192.0
6812. c11h22o-BE+ho2=>h2o2+c8h16-1+ch2coch3 1.00E+04 2.5 9400.0
6813. c11h22o-BE+h=>h2+c3h6+nc6h13coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6814. c11h22o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc6h13coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6815. c11h22o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc6h13coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
6816. c11h22o-CF+h=>h2+c7h14-1+c2h5coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6817. c11h22o-CF+oh=>h2o+c7h14-1+c2h5coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6818. c11h22o-CF+ho2=>h2o2+c7h14-1+c2h5coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
6819. c11h22o-CF+h=>h2+c4h8+nc5h11coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6820. c11h22o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc5h11coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6821. c11h22o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc5h11coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
6822. c11h22o-DG+h=>h2+c6h12-1+nc3h7coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6823. c11h22o-DG+oh=>h2o+c6h12-1+nc3h7coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6824. c11h22o-DG+ho2=>h2o2+c6h12-1+nc3h7coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
6825. c11h22o-DG+h=>h2+c5h10+nc4h9coch2 2.40E+08 1.5 2005.0
6826. c11h22o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc4h9coch2 1.20E+06 2.0 -1192.0
6827. c11h22o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9coch2 1.00E+04 2.5 9400.0
6828. c11h22o-AE+h=>h2+c8h16-1+ch2ch2hco 4.80E+08 1.5 2785.0
6829. c11h22o-AE+oh=>h2o+c8h16-1+ch2ch2hco 2.40E+06 2.0 -1192.0
6830. c11h22o-AE+ho2=>h2o2+c8h16-1+ch2ch2hco 2.50E+04 2.5 11605.0
6831. c11h22o-AE+h=>h2+c2h4+nc6h13coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
6832. c11h22o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc6h13coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
6833. c11h22o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc6h13coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
6834. c11h22o-BF+h=>h2+ch3coc2h4p+c7h14-1 2.40E+08 1.5 2005.0
6835. c11h22o-BF+oh=>h2o+ch3coc2h4p+c7h14-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
6836. c11h22o-BF+ho2=>h2o2+ch3coc2h4p+c7h14-1 1.00E+04 2.5 9400.0
6837. c11h22o-BF+h=>h2+c3h6+nc5h11coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
6838. c11h22o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc5h11coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
6839. c11h22o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc5h11coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
6840. c11h22o-CG+h=>h2+c2h5coc2h4p+c6h12-1 2.40E+08 1.5 2005.0
6841. c11h22o-CG+oh=>h2o+c2h5coc2h4p+c6h12-1 1.20E+06 2.0 -1192.0
6842. c11h22o-CG+ho2=>h2o2+c2h5coc2h4p+c6h12-1 1.00E+04 2.5 9400.0
6843. c11h22o-CG+h=>h2+c4h8+nc4h9coc2h4p 2.40E+08 1.5 2005.0
6844. c11h22o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc4h9coc2h4p 1.20E+06 2.0 -1192.0
6845. c11h22o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc4h9coc2h4p 1.00E+04 2.5 9400.0
6846. c11h22o-DH+h=>h2+c5h10+nc3h7coc2h4p 4.80E+08 1.5 2005.0
6847. c11h22o-DH+oh=>h2o+c5h10+nc3h7coc2h4p 2.40E+06 2.0 -1192.0
6848. c11h22o-DH+ho2=>h2o2+c5h10+nc3h7coc2h4p 2.50E+04 2.5 9400.0
6849. c11h22-1=ac3h5+Ac8h17 2.50E+16 0.0 70000.0
6850. c11h22-1=Dc4h7-1+Ac7h15 1.00E+16 0.0 71000.0
6851. c11h22-1=Ec5h9-1+Ac6h13 1.00E+16 0.0 71000.0
6852. c11h22-1=Fc6h11-1+Ac5h11 1.00E+16 0.0 71000.0
6853. c11h22-1=Gc7h13-1+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
6854. c11h22-1+ho2=>oh+ch2o+c10h20-1 2.50E+12 1.0 25000.0
6855. c11h22-2+ho2=>oh+ch3hco+c9h18-1 2.50E+12 1.0 25000.0
6856. c11h22-2+ho2=>oh+c2h4+c8h17hco 2.50E+12 1.0 25000.0
6857. c11h22-3+ho2=>oh+ethco+c8h16-1 2.50E+12 1.0 25000.0
6858. c11h22-3+ho2=>oh+c3h6+c7h15hco 2.50E+12 1.0 25000.0
6859. c11h22-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c7h14-1 2.50E+12 1.0 25000.0
6860. c11h22-4+ho2=>oh+c4h8+c6h13hco 2.50E+12 1.0 25000.0
6861. c11h22-5+ho2=>oh+c7h14-1+nc3h7hco 2.50E+12 1.0 25000.0
6862. c11h22-5+ho2=>oh+c5h10+c5h11hco 2.50E+12 1.0 25000.0
6863. c11h22-1+oh=ch2o+Ac10h21 1.40E+12 0.0 -900.0
6864. c11h22-2+oh=ch3hco+Ac9h19 1.40E+12 0.0 -900.0
6865. c11h22-2+oh=c2h5+c8h17hco 1.40E+12 0.0 -900.0
6866. c11h22-3+oh=ethco+Ac8h17 1.40E+12 0.0 -900.0
6867. c11h22-3+oh=nc3h7+c7h15hco 1.40E+12 0.0 -900.0
6868. c11h22-4+oh=nc3h7hco+Ac7h15 1.40E+12 0.0 -900.0
6869. c11h22-4+oh=pc4h9+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
6870. c11h22-5+oh=Ac7h15+nc3h7hco 1.40E+12 0.0 -900.0

6871. c11h22-5+oh=Ac5h11+c5h11hco 1.40E+12 0.0 -900.0
6872. c11h22-1+o=ch2o+c10h20-1 3.40E+07 1.8 550.0
6873. c11h22-2+o=ch3hco+c9h18-1 3.40E+07 1.8 550.0
6874. c11h22-2+o=c2h4+c8h17hco 3.40E+07 1.8 550.0
6875. c11h22-3+o=ethco+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
6876. c11h22-3+o=c3h6+c7h15hco 3.40E+07 1.8 550.0
6877. c11h22-4+o=nc3h7hco+c7h14-1 3.40E+07 1.8 550.0
6878. c11h22-4+o=c4h8+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
6879. c11h22-5+o=c7h14-1+nc3h7hco 3.40E+07 1.8 550.0
6880. c11h22-5+o=c5h10+c5h11hco 3.40E+07 1.8 550.0
6881. c11h22-1+ho2=oh+c11h22o-AB 1.00E+12 0.0 14400.0
6882. c11h22-2+ho2=oh+c11h22o-BC 1.00E+12 0.0 14400.0
6883. c11h22-3+ho2=oh+c11h22o-CD 1.00E+12 0.0 14400.0
6884. c11h22-4+ho2=oh+c11h22o-DE 1.00E+12 0.0 14400.0
6885. c11h22-5+ho2=oh+c11h22o-EF 1.00E+12 0.0 14400.0
6886. c11h22-1+h=h2+Cc11h21-1 1.70E+05 2.5 2490.0
6887. c11h22-1+oh=h2o+Cc11h21-1 3.10E+06 2.0 -300.0
6888. c11h22-1+ho2=h2o2+Cc11h21-1 6.80E+03 2.5 10115.0
6889. c11h22-1+ch3=ch4+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 5675.0
6890. c11h22-1+ch3o2=ch3o2h+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 5675.0
6891. c11h22-1+c2h5=c2h6+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 6835.0
6892. c11h22-1+o=oh+Cc11h21-1 6.00E+10 0.7 7682.0
6893. c11h22-2+h=h2+Cc11h21-1 1.70E+05 2.5 2490.0
6894. c11h22-2+oh=h2o+Cc11h21-1 3.10E+06 2.0 -300.0
6895. c11h22-2+ho2=h2o2+Cc11h21-1 6.80E+03 2.5 10115.0
6896. c11h22-2+ch3=ch4+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 5675.0
6897. c11h22-2+ch3o2=ch3o2h+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 5675.0
6898. c11h22-2+c2h5=c2h6+Cc11h21-1 2.20E+00 3.5 6835.0
6899. c11h22-2+o=oh+Cc11h21-1 6.00E+10 0.7 7682.0
6900. c11h22-2+h=h2+Dc11h21-2 1.70E+05 2.5 2490.0
6901. c11h22-2+oh=h2o+Dc11h21-2 3.10E+06 2.0 -300.0
6902. c11h22-2+ho2=h2o2+Dc11h21-2 6.80E+03 2.5 10115.0
6903. c11h22-2+ch3=ch4+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 5675.0
6904. c11h22-2+ch3o2=ch3o2h+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 5675.0
6905. c11h22-2+c2h5=c2h6+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 6835.0
6906. c11h22-2+o=oh+Dc11h21-2 6.00E+10 0.7 7682.0
6907. c11h22-3+h=h2+Dc11h21-2 1.70E+05 2.5 2490.0
6908. c11h22-3+oh=h2o+Dc11h21-2 3.10E+06 2.0 -300.0
6909. c11h22-3+ho2=h2o2+Dc11h21-2 6.80E+03 2.5 10115.0
6910. c11h22-3+ch3=ch4+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 5675.0
6911. c11h22-3+ch3o2=ch3o2h+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 5675.0
6912. c11h22-3+c2h5=c2h6+Dc11h21-2 2.20E+00 3.5 6835.0
6913. c11h22-3+o=oh+Dc11h21-2 6.00E+10 0.7 7682.0
6914. c11h22-3+h=h2+Ec11h21-3 1.70E+05 2.5 2490.0
6915. c11h22-3+oh=h2o+Ec11h21-3 3.10E+06 2.0 -300.0
6916. c11h22-3+ho2=h2o2+Ec11h21-3 6.80E+03 2.5 10115.0
6917. c11h22-3+ch3=ch4+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 5675.0
6918. c11h22-3+ch3o2=ch3o2h+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 5675.0
6919. c11h22-3+c2h5=c2h6+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 6835.0
6920. c11h22-3+o=oh+Ec11h21-3 6.00E+10 0.7 7682.0
6921. c11h22-4+h=h2+Ec11h21-3 1.70E+05 2.5 2490.0
6922. c11h22-4+oh=h2o+Ec11h21-3 3.10E+06 2.0 -300.0
6923. c11h22-4+ho2=h2o2+Ec11h21-3 6.80E+03 2.5 10115.0
6924. c11h22-4+ch3=ch4+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 5675.0
6925. c11h22-4+ch3o2=ch3o2h+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 5675.0
6926. c11h22-4+c2h5=c2h6+Ec11h21-3 2.20E+00 3.5 6835.0
6927. c11h22-4+o=oh+Ec11h21-3 6.00E+10 0.7 7682.0
6928. c11h22-4+h=h2+Fc11h21-4 1.70E+05 2.5 2490.0
6929. c11h22-4+oh=h2o+Fc11h21-4 3.10E+06 2.0 -300.0
6930. c11h22-4+ho2=h2o2+Fc11h21-4 6.80E+03 2.5 10115.0
6931. c11h22-4+ch3=ch4+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 5675.0

6932. c11h22-4+ch3o2=ch3o2h+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 5675.0
6933. c11h22-4+c2h5=c2h6+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 6835.0
6934. c11h22-4+o=oh+Fc11h21-4 6.00E+10 0.7 7682.0
6935. c11h22-5+h=h2+Fc11h21-4 1.70E+05 2.5 2490.0
6936. c11h22-5+oh=h2o+Fc11h21-4 3.10E+06 2.0 -300.0
6937. c11h22-5+ho2=h2o2+Fc11h21-4 6.80E+03 2.5 10115.0
6938. c11h22-5+ch3=ch4+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 5675.0
6939. c11h22-5+ch3o2=ch3o2h+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 5675.0
6940. c11h22-5+c2h5=c2h6+Fc11h21-4 2.20E+00 3.5 6835.0
6941. c11h22-5+o=oh+Fc11h21-4 6.00E+10 0.7 7682.0
6942. c11h22-5+h=h2+Gc11h21-5 1.70E+05 2.5 2490.0
6943. c11h22-5+oh=h2o+Gc11h21-5 3.10E+06 2.0 -300.0
6944. c11h22-5+ho2=h2o2+Gc11h21-5 6.80E+03 2.5 10115.0
6945. c11h22-5+ch3=ch4+Gc11h21-5 2.20E+00 3.5 5675.0
6946. c11h22-5+ch3o2=ch3o2h+Gc11h21-5 2.20E+00 3.5 5675.0
6947. c11h22-5+c2h5=c2h6+Gc11h21-5 2.20E+00 3.5 6835.0
6948. c11h22-5+o=oh+Gc11h21-5 6.00E+10 0.7 7682.0
6949. c11h22-1+oh=c11h22rBohA 2.76E+12 0.0 -1042.0
6950. c11h22rBohA+o2=c11h22qjBohA 1.00E+12 0.0 -1100.0
6951. c11h22qjBohA=>oh+ch2o+c9h19hco 1.00E+12 0.0 28680.0
6952. c11h22-2+oh=c11h22rCohB 2.76E+12 0.0 -1042.0
6953. c11h22rCohB+o2=c11h22qjCohB 1.00E+12 0.0 -1100.0
6954. c11h22qjCohB=>oh+ch3hco+c8h17hco 1.00E+12 0.0 28680.0
6955. c11h22-3+oh=c11h22rDohC 2.76E+12 0.0 -1042.0
6956. c11h22rDohC+o2=c11h22qjDohC 1.00E+12 0.0 -1100.0
6957. c11h22qjDohC=>oh+ethco+c7h15hco 1.00E+12 0.0 28680.0
6958. c11h22-4+oh=c11h22rEohD 2.76E+12 0.0 -1042.0
6959. c11h22rEohD+o2=c11h22qjEohD 1.00E+12 0.0 -1100.0
6960. c11h22qjEohD=>oh+nc3h7hco+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0
6961. c11h22-5+oh=c11h22rFohE 2.76E+12 0.0 -1042.0
6962. c11h22rFohE+o2=c11h22qjFohE 1.00E+12 0.0 -1100.0
6963. c11h22qjFohE=>oh+nc4h9hco+c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
6964. Cc11h21-1=c4h6+Ac7h15 1.34E+15 -0.5 38320.0
6965. Dc11h21-2=c5h8-13+Ac6h13 2.50E+13 0.0 35000.0
6966. Ec11h21-3=c6h10-13+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
6967. Fc11h21-4=c7h12-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
6968. Gc11h21-5=c8h14-13+nc3h7 2.50E+13 0.0 35000.0
6969. c10h21hco+h=h2+c10h21co 4.00E+13 0.0 4200.0
6970. c10h21hco+oh=h2o+c10h21co 4.20E+12 0.0 500.0
6971. c10h21hco+ho2=h2o2+c10h21co 1.00E+12 0.0 10000.0
6972. c10h21hco+ch3=ch4+c10h21co 2.00E-06 5.6 2500.0
6973. c10h21hco+c2h5=c2h6+c10h21co 1.30E+12 0.0 8500.0
6974. c10h21hco+o2=ho2+c10h21co 1.00E+13 0.0 40700.0
6975. c10h21co+M=co+Ac10h21+M 8.64E+15 0.0 14400.0
6976. c10h21co+ho2=>co2+oh+Ac10h21 2.00E+13 0.0 0.0
6977. nc12h26=Ac6h13+Ac6h13 4.43E+20 -1.0 87188.0
6978. nc12h26=Ac5h11+Ac7h15 5.77E+20 -1.1 87265.0
6979. nc12h26=pc4h9+Ac8h17 3.97E+22 -1.6 87867.0
6980. nc12h26=nc3h7+Ac9h19 3.14E+25 -2.4 86262.0
6981. nc12h26=c2h5+Ac10h21 1.45E+26 -2.6 85338.0
6982. nc12h26=ch3+Ac11h23 1.60E+22 -1.6 89651.0
6983. nc12h26=h+Ac12h25 5.30E+16 -0.2 100933.0
6984. nc12h26=h+Bc12h25 2.11E+17 -0.4 98841.0
6985. nc12h26=h+Cc12h25 2.70E+17 -0.4 98899.0
6986. nc12h26=h+Dc12h25 2.70E+17 -0.4 98899.0
6987. nc12h26=h+Ec12h25 2.70E+17 -0.4 98899.0
6988. nc12h26=h+Fc12h25 2.70E+17 -0.4 98899.0
6989. nc12h26+o2=ho2+Ac12h25 4.00E+13 0.0 50870.0
6990. nc12h26+o2=ho2+Bc12h25 8.00E+13 0.0 47690.0
6991. nc12h26+o2=ho2+Cc12h25 8.00E+13 0.0 47690.0
6992. nc12h26+o2=ho2+Dc12h25 8.00E+13 0.0 47690.0

6993. nc12h26+o2=ho2+Ec12h25 8.00E+13 0.0 47690.0
6994. nc12h26+o2=ho2+Fc12h25 8.00E+13 0.0 47690.0
6995. nc12h26+oh=h2o+Ac12h25 1.05E+10 1.0 1590.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.50E+10 1.1 23330.0
6996. nc12h26+oh=h2o+Bc12h25 9.40E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.15E+05 1.9 21910.0
6997. nc12h26+oh=h2o+Cc12h25 9.40E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.15E+05 1.9 21910.0
6998. nc12h26+oh=h2o+Dc12h25 9.40E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.15E+05 1.9 21910.0
6999. nc12h26+oh=h2o+Ec12h25 9.40E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.15E+05 1.9 21910.0
7000. nc12h26+oh=h2o+Fc12h25 9.40E+07 1.6 -35.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.15E+05 1.9 21910.0
7001. nc12h26+ho2=h2o2+Ac12h25 1.68E+13 0.0 20440.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.05E+13 -0.4 8399.0
7002. nc12h26+ho2=h2o2+Bc12h25 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
7003. nc12h26+ho2=h2o2+Cc12h25 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
7004. nc12h26+ho2=h2o2+Dc12h25 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
7005. nc12h26+ho2=h2o2+Ec12h25 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
7006. nc12h26+ho2=h2o2+Fc12h25 1.12E+13 0.0 17690.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.35E+11 0.0 8165.0
7007. nc12h26+h=h2+Ac12h25 1.88E+05 2.8 6280.0
Reverse Arrhenius coefficients: 8.93E+03 2.7 10550.0
7008. nc12h26+h=h2+Bc12h25 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
7009. nc12h26+h=h2+Cc12h25 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
7010. nc12h26+h=h2+Dc12h25 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
7011. nc12h26+h=h2+Ec12h25 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
7012. nc12h26+h=h2+Fc12h25 2.60E+06 2.4 4471.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.93E+03 2.7 11260.0
7013. o+nc12h26=oh+Ac12h25 1.93E+05 2.7 3716.0
Reverse Arrhenius coefficients: 4.02E+03 2.6 5893.0
7014. o+nc12h26=oh+Bc12h25 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
7015. o+nc12h26=oh+Cc12h25 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
7016. o+nc12h26=oh+Dc12h25 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
7017. o+nc12h26=oh+Ec12h25 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
7018. o+nc12h26=oh+Fc12h25 9.54E+04 2.7 2106.0
Reverse Arrhenius coefficients: 6.33E+01 3.0 6798.0
7019. nc12h26+ch3=ch4+Ac12h25 9.04E-01 3.6 7154.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.12E+00 3.6 11910.0
7020. nc12h26+ch3=ch4+Bc12h25 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
7021. nc12h26+ch3=ch4+Cc12h25 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
7022. nc12h26+ch3=ch4+Dc12h25 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
7023. nc12h26+ch3=ch4+Ec12h25 5.41E+04 2.3 7287.0
Reverse Arrhenius coefficients: 2.14E+03 2.6 14550.0
7024. nc12h26+ch3=ch4+Fc12h25 5.41E+04 2.3 7287.0

```
      Reverse Arrhenius coefficients:          2.14E+03    2.6    14550.0
7025. nc12h26+c2h5=c2h6+Ac12h25                1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7026. nc12h26+c2h5=c2h6+Bc12h25                1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7027. nc12h26+c2h5=c2h6+Cc12h25                1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7028. nc12h26+c2h5=c2h6+Dc12h25                1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7029. nc12h26+c2h5=c2h6+Ec12h25                1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7030. nc12h26+c2h5=c2h6+Fc12h25                4.10E+12    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7031. nc12h26+hco=ch2o+Ac12h25                 2.00E+05    2.5    18500.0
7032. nc12h26+hco=ch2o+Bc12h25                 2.20E+07    1.9    17000.0
7033. nc12h26+hco=ch2o+Cc12h25                 2.20E+07    1.9    17000.0
7034. nc12h26+hco=ch2o+Dc12h25                 2.20E+07    1.9    17000.0
7035. nc12h26+hco=ch2o+Ec12h25                 2.20E+07    1.9    17000.0
7036. nc12h26+hco=ch2o+Fc12h25                 2.20E+07    1.9    17000.0
7037. nc12h26+ch3o=ch3oh+Ac12h25               3.20E+11    0.0     7300.0
7038. nc12h26+ch3o=ch3oh+Bc12h25               2.90E+11    0.0     4500.0
7039. nc12h26+ch3o=ch3oh+Cc12h25               2.90E+11    0.0     4500.0
7040. nc12h26+ch3o=ch3oh+Dc12h25               2.90E+11    0.0     4500.0
7041. nc12h26+ch3o=ch3oh+Ec12h25               2.90E+11    0.0     4500.0
7042. nc12h26+ch3o=ch3oh+Fc12h25               2.90E+11    0.0     4500.0
7043. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Ac12h25              2.00E+02    3.0    14000.0
7044. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Bc12h25              1.20E+02    3.0    12000.0
7045. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Cc12h25              1.20E+02    3.0    12000.0
7046. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Dc12h25              1.20E+02    3.0    12000.0
7047. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Ec12h25              1.20E+02    3.0    12000.0
7048. nc12h26+ch2oh=ch3oh+Fc12h25              1.20E+02    3.0    12000.0
7049. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Ac12h25             1.20E+13    0.0    20000.0
7050. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Bc12h25             6.00E+12    0.0    17500.0
7051. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Cc12h25             6.00E+12    0.0    17500.0
7052. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Dc12h25             6.00E+12    0.0    17500.0
7053. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Ec12h25             6.00E+12    0.0    17500.0
7054. nc12h26+ch3o2=ch3o2h+Fc12h25             6.00E+12    0.0    17500.0
7055. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Ac12h25            6.00E+11    0.0    13700.0
7056. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Bc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7057. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Cc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7058. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Dc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7059. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Ec12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7060. nc12h26+ch2hco=ch3hco+Fc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7061. nc12h26+ch3co=ch3hco+Ac12h25             3.00E+11    0.0    15000.0
7062. nc12h26+ch3co=ch3hco+Bc12h25             2.00E+11    0.0    12700.0
7063. nc12h26+ch3co=ch3hco+Cc12h25             2.00E+11    0.0    12700.0
7064. nc12h26+ch3co=ch3hco+Dc12h25             2.00E+11    0.0    12700.0
7065. nc12h26+ch3co=ch3hco+Ec12h25             2.00E+11    0.0    12700.0
7066. nc12h26+ch3co=ch3hco+Fc12h25             2.00E+11    0.0    12700.0
7067. nc12h26+nc3h7=c3h8+Ac12h25               6.00E+11    0.0    13700.0
7068. nc12h26+nc3h7=c3h8+Bc12h25               4.00E+11    0.0    11400.0
7069. nc12h26+nc3h7=c3h8+Cc12h25               4.00E+11    0.0    11400.0
7070. nc12h26+nc3h7=c3h8+Dc12h25               4.00E+11    0.0    11400.0
7071. nc12h26+nc3h7=c3h8+Ec12h25               4.00E+11    0.0    11400.0
7072. nc12h26+nc3h7=c3h8+Fc12h25               4.00E+11    0.0    11400.0
7073. nc12h26+pc4h9=c4h10+Ac12h25              6.00E+11    0.0    13700.0
7074. nc12h26+pc4h9=c4h10+Bc12h25              4.00E+11    0.0    11400.0
7075. nc12h26+pc4h9=c4h10+Cc12h25              4.00E+11    0.0    11400.0
7076. nc12h26+pc4h9=c4h10+Dc12h25              4.00E+11    0.0    11400.0
7077. nc12h26+pc4h9=c4h10+Ec12h25              4.00E+11    0.0    11400.0
7078. nc12h26+pc4h9=c4h10+Fc12h25              4.00E+11    0.0    11400.0
```

```
7079. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Ac12h25            6.00E+11    0.0    13700.0
7080. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Bc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7081. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Cc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7082. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Dc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7083. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Ec12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7084. nc12h26+Ac5h11=nc5h12+Fc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7085. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Ac12h25             6.00E+11    0.0    13700.0
7086. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Bc12h25             4.00E+11    0.0    11400.0
7087. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Cc12h25             4.00E+11    0.0    11400.0
7088. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Dc12h25             4.00E+11    0.0    11400.0
7089. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Ec12h25             4.00E+11    0.0    11400.0
7090. nc12h26+Ac6h13=c6h14+Fc12h25             4.00E+11    0.0    11400.0
7091. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Ac12h25            6.00E+11    0.0    13700.0
7092. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Bc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7093. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Cc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7094. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Dc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7095. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Ec12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7096. nc12h26+Ac7h15=nc7h16+Fc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7097. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Ac12h25            6.00E+11    0.0    13700.0
7098. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Bc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7099. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Cc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7100. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Dc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7101. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Ec12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7102. nc12h26+Ac8h17=nc8h18+Fc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7103. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Ac12h25            6.00E+11    0.0    13700.0
7104. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Bc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7105. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Cc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7106. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Dc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7107. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Ec12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7108. nc12h26+Ac9h19=nc9h20+Fc12h25            4.00E+11    0.0    11400.0
7109. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Ac12h25            6.00E+11    0.0    14700.0
7110. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Bc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7111. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Cc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7112. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Dc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7113. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Ec12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7114. nc12h26+Bc9h19=nc9h20+Fc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7115. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Ac12h25            6.00E+11    0.0    14700.0
7116. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Bc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7117. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Cc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7118. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Dc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7119. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Ec12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7120. nc12h26+Cc9h19=nc9h20+Fc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7121. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Ac12h25            6.00E+11    0.0    14700.0
7122. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Bc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7123. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Cc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7124. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Dc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7125. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Ec12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7126. nc12h26+Dc9h19=nc9h20+Fc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7127. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Ac12h25            6.00E+11    0.0    14700.0
7128. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Bc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7129. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Cc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7130. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Dc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7131. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Ec12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7132. nc12h26+Ec9h19=nc9h20+Fc12h25            4.00E+11    0.0    12400.0
7133. nc12h26+Ac12h25=nc12h26+Bc12h25          4.00E+11    0.0    11400.0
7134. nc12h26+Ac12h25=nc12h26+Cc12h25          4.00E+11    0.0    11400.0
7135. nc12h26+Ac12h25=nc12h26+Dc12h25          4.00E+11    0.0    11400.0
7136. nc12h26+Ac12h25=nc12h26+Ec12h25          4.00E+11    0.0    11400.0
7137. nc12h26+Ac12h25=nc12h26+Fc12h25          4.00E+11    0.0    11400.0
7138. nc12h26+Bc12h25=nc12h26+Cc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
7139. nc12h26+Bc12h25=nc12h26+Dc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
```

```
7140. nc12h26+Bc12h25=nc12h26+Ec12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
7141. nc12h26+Bc12h25=nc12h26+Fc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
7142. nc12h26+Cc12h25=nc12h26+Dc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          4.00E+11    0.0    12400.0
7143. nc12h26+Cc12h25=nc12h26+Ec12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          4.00E+11    0.0    12400.0
7144. nc12h26+Cc12h25=nc12h26+Fc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          4.00E+11    0.0    12400.0
7145. nc12h26+Dc12h25=nc12h26+Ec12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          4.00E+11    0.0    12400.0
7146. nc12h26+Dc12h25=nc12h26+Fc12h25          4.00E+11    0.0    12400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          4.00E+11    0.0    12400.0
7147. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7148. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7149. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7150. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7151. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7152. nc12h26+c12h25qjA=c12h25qA+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7153. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7154. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7155. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7156. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7157. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7158. nc12h26+c12h25qjB=c12h25qB+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7159. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7160. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7161. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7162. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7163. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7164. nc12h26+c12h25qjC=c12h25qC+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7165. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7166. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7167. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7168. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7169. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7170. nc12h26+c12h25qjD=c12h25qD+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7171. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
```

```
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7172. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7173. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7174. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7175. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7176. nc12h26+c12h25qjE=c12h25qE+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7177. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Ac12h25       1.00E+11    0.0    13400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          3.20E+11    0.0    12300.0
7178. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Bc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7179. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Cc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7180. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Dc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7181. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Ec12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7182. nc12h26+c12h25qjF=c12h25qF+Fc12h25       1.00E+11    0.0    10400.0
      Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11    0.0    12900.0
7183. Ac12h25=Ac10h21+c2h4                     9.12E+11    0.3    27240.5
7184. Bc12h25=Ac9h19+c3h6                      6.02E+10    0.8    27822.8
7185. Cc12h25=Ac8h17+c4h8                      2.04E+13    0.0    28496.5
7186. Cc12h25=ch3+c11h22-1                     9.55E+09    1.1    29390.7
7187. Dc12h25=Ac7h15+c5h10                     2.04E+13    0.0    28496.5
7188. Dc12h25=c2h5+c10h20-1                    8.51E+09    1.1    27025.9
7189. Ec12h25=Ac6h13+c6h12-1                   2.04E+13    0.0    28496.5
7190. Ec12h25=nc3h7+c9h18-1                    5.50E+11    0.6    28087.1
7191. Fc12h25=pc4h9+c8h16-1                    2.04E+13    0.0    28496.5
7192. Fc12h25=c7h14-1+Ac5h11                   2.04E+13    0.0    28496.5
7193. Ac12h25=h+c12h24-1                       3.00E+13    0.0    38000.0
7194. Bc12h25=h+c12h24-1                       3.00E+13    0.0    38000.0
7195. Bc12h25=h+c12h24-2                       3.00E+13    0.0    39000.0
7196. Cc12h25=h+c12h24-2                       3.00E+13    0.0    38000.0
7197. Cc12h25=h+c12h24-3                       3.00E+13    0.0    38000.0
7198. Dc12h25=h+c12h24-3                       3.00E+13    0.0    38000.0
7199. Dc12h25=h+c12h24-4                       3.00E+13    0.0    38000.0
7200. Ec12h25=h+c12h24-4                       3.00E+13    0.0    38000.0
7201. Ec12h25=h+c12h24-5                       3.00E+13    0.0    38000.0
7202. Fc12h25=h+c12h24-5                       3.00E+13    0.0    38000.0
7203. Fc12h25=h+c12h24-6                       3.00E+13    0.0    38000.0
7204. Ac12h25+o2=c12h24-1+ho2                  1.90E+12    0.0     5000.0
7205. Bc12h25+o2=c12h24-1+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7206. Bc12h25+o2=c12h24-2+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7207. Cc12h25+o2=c12h24-2+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7208. Cc12h25+o2=c12h24-3+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7209. Dc12h25+o2=c12h24-3+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7210. Dc12h25+o2=c12h24-4+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7211. Ec12h25+o2=c12h24-4+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7212. Ec12h25+o2=c12h24-5+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7213. Fc12h25+o2=c12h24-5+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7214. Fc12h25+o2=c12h24-6+ho2                  1.80E+10    0.0    -2000.0
7215. Ac12h25+o=ch2o+Ac11h23                   2.00E+13    0.0     4000.0
7216. Bc12h25+o=ch3hco+Ac10h21                 2.00E+13    0.0     4000.0
7217. Bc12h25+o=ch3+c10h21hco                  2.00E+13    0.0     4000.0
7218. Cc12h25+o=ethco+Ac9h19                   2.00E+13    0.0     4000.0
7219. Cc12h25+o=c2h5+c9h19hco                  2.00E+13    0.0     4000.0
7220. Dc12h25+o=nc3h7+c8h17hco                 2.00E+13    0.0     4000.0
```

7221.	Dc12h25+o=nc3h7hco+Ac8h17	2.00E+13	0.0	4000.0
7222.	Ec12h25+o=pc4h9+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7223.	Ec12h25+o=nc4h9hco+Ac7h15	2.00E+13	0.0	4000.0
7224.	Fc12h25+o=Ac5h11+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7225.	Fc12h25+o=c5h11hco+Ac6h13	2.00E+13	0.0	4000.0
7226.	Ac12h25+oh=ch2o+nc11h24	2.00E+13	0.0	4000.0
7227.	Bc12h25+oh=ch3hco+nc10h22	2.00E+13	0.0	4000.0
7228.	Bc12h25+oh=ch4+c10h21hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7229.	Cc12h25+oh=ethco+nc9h20	2.00E+13	0.0	4000.0
7230.	Cc12h25+oh=c2h6+c9h19hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7231.	Dc12h25+oh=c3h8+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7232.	Dc12h25+oh=nc3h7hco+nc8h18	2.00E+13	0.0	4000.0
7233.	Ec12h25+oh=c4h10+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7234.	Ec12h25+oh=nc4h9hco+nc7h16	2.00E+13	0.0	4000.0
7235.	Fc12h25+oh=nc5h12+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7236.	Fc12h25+oh=c5h11hco+c6h14	2.00E+13	0.0	4000.0
7237.	Ac12h25+ho2=ch2o+Ac11h23+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7238.	Bc12h25+ho2=ch3hco+Ac10h21+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7239.	Bc12h25+ho2=ch3+c10h21hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7240.	Cc12h25+ho2=ethco+Ac9h19+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7241.	Cc12h25+ho2=c2h5+c9h19hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7242.	Dc12h25+ho2=nc3h7+c8h17hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7243.	Dc12h25+ho2=nc3h7hco+Ac8h17+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7244.	Ec12h25+ho2=pc4h9+c7h15hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7245.	Ec12h25+ho2=nc4h9hco+Ac7h15+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7246.	Fc12h25+ho2=Ac5h11+c6h13hco+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7247.	Fc12h25+ho2=c5h11hco+Ac6h13+oh	5.00E+12	0.0	0.0
7248.	Ac12h25=Cc12h25	3.35E+09	1.0	37000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.02E+09	1.0	39500.0
7249.	Ac12h25=Dc12h25	5.75E+08	1.0	17300.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	8.63E+08	1.0	19800.0
7250.	Ac12h25=Ec12h25	9.89E+07	1.0	12000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.48E+08	1.0	14500.0
7251.	Ac12h25=Fc12h25	9.77E+06	1.1	17340.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.44E+07	1.1	19840.0
7252.	Bc12h25=Dc12h25	3.35E+09	1.0	37000.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.35E+09	1.0	37000.0
7253.	Bc12h25=Ec12h25	5.76E+08	1.0	17302.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.76E+08	1.0	17302.0
7254.	Bc12h25=Fc12h25	6.44E+07	1.1	11946.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.44E+07	1.1	11946.0
7255.	Cc12h25=Dc12h25	2.92E+06	1.0	20900.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.92E+06	1.0	20900.0
7256.	Cc12h25=Ec12h25	2.95E+00	3.1	11017.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.95E+00	3.1	11017.0
7257.	Cc12h25=Fc12h25	1.40E-01	3.7	12982.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.40E-01	3.7	12982.0
7258.	Dc12h25=Ec12h25	1.86E+00	3.3	13199.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.86E+00	3.3	13199.0
7259.	Dc12h25=Fc12h25	1.41E+00	3.3	16146.0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.41E+00	3.3	16146.0
7260.	Ac12h25+o2=c12h25qjA	9.00E+18	-2.5	0.0
7261.	Bc12h25+o2=c12h25qjB	1.70E+19	-2.5	0.0
7262.	Cc12h25+o2=c12h25qjC	1.80E+19	-2.5	0.0
7263.	Dc12h25+o2=c12h25qjD	1.80E+19	-2.5	0.0
7264.	Ec12h25+o2=c12h25qjE	1.80E+19	-2.5	0.0
7265.	Fc12h25+o2=c12h25qjF	1.80E+19	-2.5	0.0
7266.	Ac12h25+ho2=c12h25ojA+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7267.	Bc12h25+ho2=c12h25ojB+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7268.	Cc12h25+ho2=c12h25ojC+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7269.	Dc12h25+ho2=c12h25ojD+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7270.	Ec12h25+ho2=c12h25ojE+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7271.	Fc12h25+ho2=c12h25ojF+oh	7.00E+12	0.0	-1000.0
7272.	Ac12h25+ch3o2=c12h25ojA+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7273.	Bc12h25+ch3o2=c12h25ojB+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7274.	Cc12h25+ch3o2=c12h25ojC+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7275.	Dc12h25+ch3o2=c12h25ojD+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7276.	Ec12h25+ch3o2=c12h25ojE+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7277.	Fc12h25+ch3o2=c12h25ojF+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7278.	Ac12h25+c2h5o2=c12h25ojA+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7279.	Bc12h25+c2h5o2=c12h25ojB+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7280.	Cc12h25+c2h5o2=c12h25ojC+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7281.	Dc12h25+c2h5o2=c12h25ojD+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7282.	Ec12h25+c2h5o2=c12h25ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7283.	Fc12h25+c2h5o2=c12h25ojE+c2h5o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7284.	Ac12h25+nc3h7o2=c12h25ojA+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7285.	Bc12h25+nc3h7o2=c12h25ojB+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7286.	Cc12h25+nc3h7o2=c12h25ojC+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7287.	Dc12h25+nc3h7o2=c12h25ojD+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7288.	Ec12h25+nc3h7o2=c12h25ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7289.	Fc12h25+nc3h7o2=c12h25ojE+nc3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7290.	Ac12h25+ic3h7o2=c12h25ojA+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7291.	Bc12h25+ic3h7o2=c12h25ojB+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7292.	Cc12h25+ic3h7o2=c12h25ojC+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7293.	Dc12h25+ic3h7o2=c12h25ojD+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7294.	Ec12h25+ic3h7o2=c12h25ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7295.	Fc12h25+ic3h7o2=c12h25ojE+ic3h7o	7.00E+12	0.0	-1000.0
7296.	Ac12h25+c12h25qjA=2c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7297.	Bc12h25+c12h25qjA=c12h25ojB+c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7298.	Cc12h25+c12h25qjA=c12h25ojC+c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7299.	Dc12h25+c12h25qjA=c12h25ojD+c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7300.	Ec12h25+c12h25qjA=c12h25ojE+c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7301.	Fc12h25+c12h25qjA=c12h25ojF+c12h25ojA	7.00E+12	0.0	-1000.0
7302.	Ac12h25+c12h25qjB=c12h25ojA+c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7303.	Bc12h25+c12h25qjB=2c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7304.	Cc12h25+c12h25qjB=c12h25ojC+c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7305.	Dc12h25+c12h25qjB=c12h25ojD+c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7306.	Ec12h25+c12h25qjB=c12h25ojE+c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7307.	Fc12h25+c12h25qjB=c12h25ojF+c12h25ojB	7.00E+12	0.0	-1000.0
7308.	Ac12h25+c12h25qjC=c12h25ojA+c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7309.	Bc12h25+c12h25qjC=c12h25ojB+c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7310.	Cc12h25+c12h25qjC=2c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7311.	Dc12h25+c12h25qjC=c12h25ojD+c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7312.	Ec12h25+c12h25qjC=c12h25ojE+c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7313.	Fc12h25+c12h25qjC=c12h25ojF+c12h25ojC	7.00E+12	0.0	-1000.0
7314.	Ac12h25+c12h25qjD=c12h25ojA+c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7315.	Bc12h25+c12h25qjD=c12h25ojB+c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7316.	Cc12h25+c12h25qjD=c12h25ojC+c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7317.	Dc12h25+c12h25qjD=2c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7318.	Ec12h25+c12h25qjD=c12h25ojE+c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7319.	Fc12h25+c12h25qjD=c12h25ojF+c12h25ojD	7.00E+12	0.0	-1000.0
7320.	Ac12h25+c12h25qjE=c12h25ojA+c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7321.	Bc12h25+c12h25qjE=c12h25ojB+c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7322.	Cc12h25+c12h25qjE=c12h25ojC+c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7323.	Dc12h25+c12h25qjE=c12h25ojD+c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7324.	Ec12h25+c12h25qjE=2c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7325.	Fc12h25+c12h25qjE=c12h25ojF+c12h25ojE	7.00E+12	0.0	-1000.0
7326.	Ac12h25+c12h25qjF=c12h25ojA+c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7327.	Bc12h25+c12h25qjF=c12h25ojB+c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7328.	Cc12h25+c12h25qjF=c12h25ojC+c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7329.	Dc12h25+c12h25qjF=c12h25ojD+c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7330.	Ec12h25+c12h25qjF=c12h25ojE+c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7331.	Fc12h25+c12h25qjF=2c12h25ojF	7.00E+12	0.0	-1000.0
7332.	c12h25ojA=ch2o+Ac11h23	2.00E+13	0.0	4000.0
7333.	c12h25ojB=ch3hco+Ac10h21	2.00E+13	0.0	4000.0
7334.	c12h25ojB=ch3+c10h21hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7335.	c12h25ojC=ethco+Ac9h19	2.00E+13	0.0	4000.0
7336.	c12h25ojC=c2h5+c9h19hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7337.	c12h25ojD=nc3h7+c8h17hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7338.	c12h25ojD=nc3h7hco+Ac8h17	2.00E+13	0.0	4000.0
7339.	c12h25ojE=pc4h9+c7h15hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7340.	c12h25ojE=nc4h9hco+Ac7h15	2.00E+13	0.0	4000.0
7341.	c12h25ojF=Ac5h11+c6h13hco	2.00E+13	0.0	4000.0
7342.	c12h25ojF=c5h11hco+Ac6h13	2.00E+13	0.0	4000.0
7343.	c12h25qA=oh+c12h25ojA	1.50E+16	0.0	42500.0
7344.	c12h25qB=oh+c12h25ojB	1.25E+16	0.0	41600.0
7345.	c12h25qC=oh+c12h25ojC	1.25E+16	0.0	41600.0
7346.	c12h25qD=oh+c12h25ojD	1.25E+16	0.0	41600.0
7347.	c12h25qE=oh+c12h25ojE	1.25E+16	0.0	41600.0
7348.	c12h25qF=oh+c12h25ojF	1.25E+16	0.0	41600.0
7349.	c12h25qjA=c12h24rBqA	3.35E+09	1.0	32500.0
7350.	c12h25qjA=c12h24rCqA	5.75E+08	1.0	25000.0
7351.	c12h25qjA=c12h24rDqA	9.89E+07	1.0	22000.0
7352.	c12h25qjA=c12h24rEqA	1.70E+07	1.0	21000.0
7353.	c12h25qjB=c12h24rAqB	5.03E+09	1.0	35500.0
7354.	c12h25qjB=c12h24rCqB	3.35E+09	1.0	32500.0
7355.	c12h25qjB=c12h24rDqB	5.75E+08	1.0	25000.0
7356.	c12h25qjB=c12h24rEqB	9.89E+07	1.0	22000.0
7357.	c12h25qjB=c12h24rFqB	1.70E+07	1.0	21000.0
7358.	c12h25qjC=c12h24rAqC	8.63E+08	1.0	28000.0
7359.	c12h25qjC=c12h24rBqC	3.35E+09	1.0	32500.0
7360.	c12h25qjC=c12h24rDqC	3.35E+09	1.0	32500.0
7361.	c12h25qjC=c12h24rEqC	5.75E+08	1.0	25000.0
7362.	c12h25qjC=c12h24rFqC	9.89E+07	1.0	22000.0
7363.	c12h25qjC=c12h24rGqC	1.70E+07	1.0	21000.0
7364.	c12h25qjD=c12h24rAqD	1.48E+08	1.0	25000.0
7365.	c12h25qjD=c12h24rBqD	5.75E+08	1.0	25000.0
7366.	c12h25qjD=c12h24rCqD	3.35E+09	1.0	32500.0
7367.	c12h25qjD=c12h24rEqD	3.35E+09	1.0	32500.0
7368.	c12h25qjD=c12h24rFqD	5.75E+08	1.0	25000.0
7369.	c12h25qjD=c12h24rGqD	9.89E+07	1.0	22000.0
7370.	c12h25qjD=c12h24rHqD	1.70E+07	1.0	21000.0
7371.	c12h25qjE=c12h24rAqE	2.55E+07	1.0	24000.0
7372.	c12h25qjE=c12h24rBqE	9.89E+07	1.0	22000.0
7373.	c12h25qjE=c12h24rCqE	5.75E+08	1.0	25000.0
7374.	c12h25qjE=c12h24rDqE	3.35E+09	1.0	32500.0
7375.	c12h25qjE=c12h24rFqE	3.35E+09	1.0	32500.0
7376.	c12h25qjE=c12h24rGqE	5.75E+08	1.0	25000.0
7377.	c12h25qjE=c12h24rHqE	9.89E+07	1.0	22000.0
7378.	c12h25qjE=c12h24rIqE	1.70E+07	1.0	21000.0
7379.	c12h25qjF=c12h24rBqF	1.70E+07	1.0	21000.0
7380.	c12h25qjF=c12h24rCqF	9.89E+07	1.0	22000.0
7381.	c12h25qjF=c12h24rDqF	5.75E+08	1.0	25000.0
7382.	c12h25qjF=c12h24rEqF	3.35E+09	1.0	32500.0
7383.	c12h25qjF=c12h24rGqF	3.35E+09	1.0	32500.0
7384.	c12h25qjF=c12h24rHqF	5.75E+08	1.0	25000.0
7385.	c12h25qjF=c12h24rIqF	9.89E+07	1.0	22000.0
7386.	c12h25qjF=c12h24rJqF	1.70E+07	1.0	21000.0
7387.	c12h25qjA+ho2=c12h25qA+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7388.	c12h25qjB+ho2=c12h25qB+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7389.	c12h25qjC+ho2=c12h25qC+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7390.	c12h25qjD+ho2=c12h25qD+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7391.	c12h25qjE+ho2=c12h25qE+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7392.	c12h25qjF+ho2=c12h25qF+o2	2.90E+11	0.0	1550.0
7393.	c12h25qjA+h2o2=c12h25qA+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7394.	c12h25qjB+h2o2=c12h25qB+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7395.	c12h25qjC+h2o2=c12h25qC+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7396.	c12h25qjD+h2o2=c12h25qD+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7397.	c12h25qjE+h2o2=c12h25qE+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7398.	c12h25qjF+h2o2=c12h25qF+ho2	2.40E+12	0.0	10000.0
7399.	c12h25qjA+ho2=>c12h25ojA+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7400.	c12h25qjB+ho2=>c12h25ojB+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7401.	c12h25qjC+ho2=>c12h25ojC+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7402.	c12h25qjD+ho2=>c12h25ojD+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7403.	c12h25qjE+ho2=>c12h25ojE+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7404.	c12h25qjF+ho2=>c12h25ojF+oh+o2	1.00E+11	0.0	0.0
7405.	c12h24rBqA+o2=c12h24qjBqA	1.70E+19	-2.5	0.0
7406.	c12h24rCqA+o2=c12h24qjCqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7407.	c12h24rDqA+o2=c12h24qjDqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7408.	c12h24rEqA+o2=c12h24qjEqA	1.80E+19	-2.5	0.0
7409.	c12h24rAqB+o2=c12h24qjAqB	9.00E+18	-2.5	0.0
7410.	c12h24rCqB+o2=c12h24qjCqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7411.	c12h24rDqB+o2=c12h24qjDqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7412.	c12h24rEqB+o2=c12h24qjEqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7413.	c12h24rFqB+o2=c12h24qjFqB	1.80E+19	-2.5	0.0
7414.	c12h24rAqC+o2=c12h24qjAqC	9.00E+18	-2.5	0.0
7415.	c12h24rBqC+o2=c12h24qjBqC	1.70E+19	-2.5	0.0
7416.	c12h24rDqC+o2=c12h24qjDqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7417.	c12h24rEqC+o2=c12h24qjEqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7418.	c12h24rFqC+o2=c12h24qjFqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7419.	c12h24rGqC+o2=c12h24qjGqC	1.80E+19	-2.5	0.0
7420.	c12h24rAqD+o2=c12h24qjAqD	9.00E+18	-2.5	0.0
7421.	c12h24rBqD+o2=c12h24qjBqD	1.70E+19	-2.5	0.0
7422.	c12h24rCqD+o2=c12h24qjCqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7423.	c12h24rEqD+o2=c12h24qjEqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7424.	c12h24rFqD+o2=c12h24qjFqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7425.	c12h24rGqD+o2=c12h24qjGqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7426.	c12h24rHqD+o2=c12h24qjHqD	1.80E+19	-2.5	0.0
7427.	c12h24rAqE+o2=c12h24qjAqE	9.00E+18	-2.5	0.0
7428.	c12h24rBqE+o2=c12h24qjBqE	1.70E+19	-2.5	0.0
7429.	c12h24rCqE+o2=c12h24qjCqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7430.	c12h24rDqE+o2=c12h24qjDqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7431.	c12h24rFqE+o2=c12h24qjFqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7432.	c12h24rGqE+o2=c12h24qjGqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7433.	c12h24rHqE+o2=c12h24qjHqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7434.	c12h24rIqE+o2=c12h24qjIqE	1.80E+19	-2.5	0.0
7435.	c12h24rBqF+o2=c12h24qjBqF	1.70E+19	-2.5	0.0
7436.	c12h24rCqF+o2=c12h24qjCqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7437.	c12h24rDqF+o2=c12h24qjDqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7438.	c12h24rEqF+o2=c12h24qjEqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7439.	c12h24rGqF+o2=c12h24qjGqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7440.	c12h24rHqF+o2=c12h24qjHqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7441.	c12h24rIqF+o2=c12h24qjIqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7442.	c12h24rJqF+o2=c12h24qjJqF	1.80E+19	-2.5	0.0
7443.	c12h24rCqA=>oh+ch2o+c11h22-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7444.	c12h24rDqB=>oh+ch3hco+c10h20-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7445.	c12h24rAqC=>oh+c9h19hco+c2h4	5.00E+13	0.0	25500.0
7446.	c12h24rEqC=>oh+ethco+c9h18-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7447.	c12h24rBqD=>oh+c8h17hco+c3h6	5.00E+13	0.0	25500.0
7448.	c12h24rFqD=>oh+nc3h7hco+c8h16-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7449.	c12h24rCqE=>oh+c7h15hco+c4h8	5.00E+13	0.0	25500.0
7450.	c12h24rGqE=>oh+nc4h9hco+c7h14-1	5.00E+13	0.0	25500.0
7451.	c12h24rDqF=>oh+c6h13hco+c5h10	5.00E+13	0.0	25500.0
7452.	c12h24rHqF=>oh+c5h11hco+c6h12-1	5.00E+13	0.0	25500.0

7453.	c12h24rBqA=oh+c12h24o-AB	1.40E+12	0.0	15900.0
7454.	c12h24rCqA=oh+c12h24o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7455.	c12h24rDqA=oh+c12h24o-AD	3.60E+10	0.0	13050.0
7456.	c12h24rAqB=oh+c12h24o-AB	1.40E+12	0.0	15900.0
7457.	c12h24rCqB=oh+c12h24o-BC	1.40E+12	0.0	15900.0
7458.	c12h24rDqB=oh+c12h24o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7459.	c12h24rEqB=oh+c12h24o-BE	3.60E+10	0.0	13050.0
7460.	c12h24rAqC=oh+c12h24o-AC	2.04E+11	0.0	19500.0
7461.	c12h24rBqC=oh+c12h24o-BC	1.40E+12	0.0	15900.0
7462.	c12h24rDqC=oh+c12h24o-CD	1.40E+12	0.0	15900.0
7463.	c12h24rEqC=oh+c12h24o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
7464.	c12h24rFqC=oh+c12h24o-CF	3.60E+10	0.0	13050.0
7465.	c12h24rAqD=oh+c12h24o-AD	3.60E+10	0.0	13050.0
7466.	c12h24rBqD=oh+c12h24o-BD	2.04E+11	0.0	19500.0
7467.	c12h24rCqD=oh+c12h24o-CD	1.40E+12	0.0	15900.0
7468.	c12h24rEqD=oh+c12h24o-DE	1.40E+12	0.0	15900.0
7469.	c12h24rFqD=oh+c12h24o-DF	2.04E+11	0.0	19500.0
7470.	c12h24rGqD=oh+c12h24o-DG	3.60E+10	0.0	13050.0
7471.	c12h24rBqE=oh+c12h24o-BE	3.60E+10	0.0	13050.0
7472.	c12h24rCqE=oh+c12h24o-CE	2.04E+11	0.0	19500.0
7473.	c12h24rDqE=oh+c12h24o-DE	1.40E+12	0.0	15900.0
7474.	c12h24rFqE=oh+c12h24o-EF	1.40E+12	0.0	15900.0
7475.	c12h24rGqE=oh+c12h24o-EG	2.04E+11	0.0	19500.0
7476.	c12h24rHqE=oh+c12h24o-EH	3.60E+10	0.0	13050.0
7477.	c12h24rBqF=oh+c12h24o-BF	3.60E+10	0.0	13050.0
7478.	c12h24rCqF=oh+c12h24o-CF	2.04E+11	0.0	19500.0
7479.	c12h24rDqF=oh+c12h24o-DF	1.40E+12	0.0	15900.0
7480.	c12h24rEqF=oh+c12h24o-EF	1.40E+12	0.0	15900.0
7481.	c12h24rGqF=oh+c12h24o-FG	2.04E+11	0.0	19500.0
7482.	c12h24rHqF=oh+c12h24o-EG	3.60E+10	0.0	13050.0
7483.	ho2+c12h24-1=c12h24rAqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7484.	ho2+c12h24-1=c12h24rBqA	1.50E+11	0.0	7800.0
7485.	ho2+c12h24-2=c12h24rBqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7486.	ho2+c12h24-2=c12h24rCqB	1.50E+11	0.0	7800.0
7487.	ho2+c12h24-3=c12h24rCqD	1.50E+11	0.0	7800.0
7488.	ho2+c12h24-3=c12h24rDqC	1.50E+11	0.0	7800.0
7489.	ho2+c12h24-4=c12h24rDqE	1.50E+11	0.0	7800.0
7490.	ho2+c12h24-4=c12h24rEqD	1.50E+11	0.0	7800.0
7491.	ho2+c12h24-5=c12h24rEqF	1.50E+11	0.0	7800.0
7492.	ho2+c12h24-5=c12h24rFqE	1.50E+11	0.0	7800.0
7493.	ho2+c12h24-6=c12h24rFqG	1.50E+11	0.0	7800.0
7494.	ho2+c12h24-6=c12h24rGqF	1.50E+11	0.0	7800.0
7495.	c12h24qjBqA=oh+c12h23oAqB	3.35E+09	1.0	35500.0
7496.	c12h24qjCqA=oh+c12h23oAqC	5.75E+08	1.0	28000.0
7497.	c12h24qjDqA=oh+c12h23oAqD	9.89E+07	1.0	25000.0
7498.	c12h24qjEqA=oh+c12h23oAqE	1.70E+07	1.0	24000.0
7499.	c12h24qjAqB=oh+c12h23oBqA	1.68E+09	1.0	32500.0
7500.	c12h24qjCqB=oh+c12h23oBqC	1.68E+09	1.0	32500.0
7501.	c12h24qjDqB=oh+c12h23oBqD	2.88E+08	1.0	25000.0
7502.	c12h24qjEqB=oh+c12h23oBqE	4.94E+07	1.0	22000.0
7503.	c12h24qjFqB=oh+c12h23oBqF	8.50E+06	1.0	21000.0
7504.	c12h24qjAqC=oh+c12h23oCqA	2.88E+08	1.0	25000.0
7505.	c12h24qjBqC=oh+c12h23oCqB	1.68E+09	1.0	32500.0
7506.	c12h24qjDqC=oh+c12h23oCqD	1.68E+09	1.0	32500.0
7507.	c12h24qjEqC=oh+c12h23oCqE	2.88E+08	1.0	25000.0
7508.	c12h24qjFqC=oh+c12h23oCqF	4.94E+07	1.0	22000.0
7509.	c12h24qjGqC=oh+c12h23oCqG	8.50E+06	1.0	21000.0
7510.	c12h24qjAqD=oh+c12h23oDqA	4.94E+07	1.0	22000.0
7511.	c12h24qjBqD=oh+c12h23oDqB	2.88E+08	1.0	25000.0
7512.	c12h24qjCqD=oh+c12h23oDqC	1.68E+09	1.0	32500.0
7513.	c12h24qjEqD=oh+c12h23oDqE	1.68E+09	1.0	32500.0
7514.	c12h24qjFqD=oh+c12h23oDqF	2.88E+08	1.0	25000.0
7515.	c12h24qjGqD=oh+c12h23oDqG	4.94E+07	1.0	22000.0
7516.	c12h24qjHqD=oh+c12h23oDqH	8.50E+06	1.0	21000.0
7517.	c12h24qjAqE=oh+c12h23oEqA	8.50E+06	1.0	21000.0
7518.	c12h24qjBqE=oh+c12h23oEqB	4.94E+07	1.0	22000.0
7519.	c12h24qjCqE=oh+c12h23oEqC	2.88E+08	1.0	25000.0
7520.	c12h24qjDqE=oh+c12h23oEqD	1.68E+09	1.0	32500.0
7521.	c12h24qjFqE=oh+c12h23oEqF	1.68E+09	1.0	32500.0
7522.	c12h24qjGqE=oh+c12h23oEqG	2.88E+08	1.0	25000.0
7523.	c12h24qjHqE=oh+c12h23oEqH	4.94E+07	1.0	22000.0
7524.	c12h24qjIqE=oh+c12h23oEqI	8.50E+06	1.0	21000.0
7525.	c12h24qjBqF=oh+c12h23oFqB	8.50E+06	1.0	21000.0
7526.	c12h24qjCqF=oh+c12h23oFqC	4.94E+07	1.0	22000.0
7527.	c12h24qjDqF=oh+c12h23oFqD	2.88E+08	1.0	25000.0
7528.	c12h24qjEqF=oh+c12h23oFqE	1.68E+09	1.0	32500.0
7529.	c12h24qjGqF=oh+c12h23oFqG	1.68E+09	1.0	32500.0
7530.	c12h24qjHqF=oh+c12h23oFqH	2.88E+08	1.0	25000.0
7531.	c12h24qjIqF=oh+c12h23oFqI	4.94E+07	1.0	22000.0
7532.	c12h24qjJqF=oh+c12h23oFqJ	8.50E+06	1.0	21000.0
7533.	c12h23oAqB=oh+hco+c10h21hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7534.	c12h23oAqC=oh+ch2hco+c9h19hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7535.	c12h23oAqD=oh+ch2ch2hco+c8h17hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7536.	c12h23oAqE=oh+c3h6cho-1+c7h15hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7537.	c12h23oBqA=oh+ch2o+c10h21co	1.50E+16	0.0	44500.0
7538.	c12h23oBqC=oh+ch3co+c9h19hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7539.	c12h23oBqD=oh+ch2coch3+c8h17hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7540.	c12h23oBqE=oh+ch3coc2h4p+c7h15hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7541.	c12h23oBqF=oh+c3h6coch3-1+c6h13hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7542.	c12h23oCqA=oh+ch2o+nc9h19coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7543.	c12h23oCqB=oh+ch3hco+c9h19co	1.50E+16	0.0	44500.0
7544.	c12h23oCqD=oh+c2h5co+c8h17hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7545.	c12h23oCqE=oh+c2h5coch2+c7h15hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7546.	c12h23oCqF=oh+c2h5coc2h4p+c6h13hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7547.	c12h23oCqG=oh+c2h5coc3h6-1+c5h11hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7548.	c12h23oDqA=oh+ch2o+nc8h17coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7549.	c12h23oDqB=oh+ch3hco+nc8h17coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7550.	c12h23oDqC=oh+ethco+c8h17co	1.50E+16	0.0	44500.0
7551.	c12h23oDqE=oh+c3h7co+c7h15hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7552.	c12h23oDqF=oh+c6h13hco+nc3h7coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7553.	c12h23oDqG=oh+c5h11hco+nc3h7coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7554.	c12h23oDqH=oh+nc4h9hco+nc3h7coc3h6-1	1.50E+16	0.0	44500.0
7555.	c12h23oEqA=oh+ch2o+nc7h15coc3h6-1	1.50E+16	0.0	44500.0
7556.	c12h23oEqB=oh+ch3hco+nc7h15coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7557.	c12h23oEqC=oh+ethco+nc7h15coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7558.	c12h23oEqD=oh+nc3h7hco+c7h15co	1.50E+16	0.0	44500.0
7559.	c12h23oEqF=oh+nc4h9co+c6h13hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7560.	c12h23oEqG=oh+c5h11hco+nc4h9coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7561.	c12h23oEqH=oh+nc4h9hco+nc4h9coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7562.	c12h23oEqI=oh+nc3h7hco+nc4h9coc3h6-1	1.50E+16	0.0	44500.0
7563.	c12h23oFqB=oh+ch3hco+nc6h13coc3h6-1	1.50E+16	0.0	44500.0
7564.	c12h23oFqC=oh+ethco+nc6h13coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7565.	c12h23oFqD=oh+nc3h7hco+nc6h13coch2	1.50E+16	0.0	44500.0
7566.	c12h23oFqE=oh+nc4h9hco+c6h13co	1.50E+16	0.0	44500.0
7567.	c12h23oFqG=oh+c5h11co+c5h11hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7568.	c12h23oFqH=oh+nc5h11coch2+nc4h9hco	1.50E+16	0.0	44500.0
7569.	c12h23oFqI=oh+nc3h7hco+nc5h11coc2h4p	1.50E+16	0.0	44500.0
7570.	c12h23oFqJ=oh+ethco+nc5h11coc3h6-1	1.50E+16	0.0	44500.0
7571.	c12h24o-AB+h=>h2+acrol+Ac9h19	4.80E+08	1.5	2785.0
7572.	c12h24o-AB+oh=>h2o+acrol+Ac9h19	2.40E+06	2.0	-1192.0
7573.	c12h24o-AB+ho2=>h2o2+acrol+Ac9h19	2.50E+04	2.5	11605.0
7574.	c12h24o-AB+h=>h2+ch2co+Ac10h21	2.40E+08	1.5	2005.0
7575.	c12h24o-AB+oh=>h2o+ch2co+Ac10h21	1.20E+06	2.0	-1192.0
7576.	c12h24o-AB+ho2=>h2o2+ch2co+Ac10h21	1.00E+04	2.5	9400.0
7577.	c12h24o-BC+h=>h2+mvk+Ac8h17	2.40E+08	1.5	2005.0
7578.	c12h24o-BC+oh=>h2o+mvk+Ac8h17	1.20E+06	2.0	-1192.0
7579.	c12h24o-BC+ho2=>h2o2+mvk+Ac8h17	1.00E+04	2.5	9400.0
7580.	c12h24o-BC+h=>h2+ch3chco+Ac9h19	2.40E+08	1.5	2005.0
7581.	c12h24o-BC+oh=>h2o+ch3chco+Ac9h19	1.20E+06	2.0	-1192.0
7582.	c12h24o-BC+ho2=>h2o2+ch3chco+Ac9h19	1.00E+04	2.5	9400.0
7583.	c12h24o-CD+h=>h2+c2h5coc2h3+Ac7h15	2.40E+08	1.5	2005.0
7584.	c12h24o-CD+oh=>h2o+c2h5coc2h3+Ac7h15	1.20E+06	2.0	-1192.0
7585.	c12h24o-CD+ho2=>h2o2+c2h5coc2h3+Ac7h15	1.00E+04	2.5	9400.0
7586.	c12h24o-CD+h=>h2+ch3+c2h3coc8h17	2.40E+08	1.5	2005.0
7587.	c12h24o-CD+oh=>h2o+ch3+c2h3coc8h17	1.20E+06	2.0	-1192.0
7588.	c12h24o-CD+ho2=>h2o2+ch3+c2h3coc8h17	1.00E+04	2.5	9400.0
7589.	c12h24o-DE+h=>h2+c2h3coc3h7+Ac6h13	2.40E+08	1.5	2005.0
7590.	c12h24o-DE+oh=>h2o+c2h3coc3h7+Ac6h13	1.20E+06	2.0	-1192.0
7591.	c12h24o-DE+ho2=>h2o2+c2h3coc3h7+Ac6h13	1.00E+04	2.5	9400.0
7592.	c12h24o-DE+h=>h2+c2h5+c2h3coc7h15	2.40E+08	1.5	2005.0
7593.	c12h24o-DE+oh=>h2o+c2h5+c2h3coc7h15	1.20E+06	2.0	-1192.0
7594.	c12h24o-DE+ho2=>h2o2+c2h5+c2h3coc7h15	1.00E+04	2.5	9400.0
7595.	c12h24o-EF+h=>h2+c2h3coc4h9+Ac5h11	2.40E+08	1.5	2005.0
7596.	c12h24o-EF+oh=>h2o+c2h3coc4h9+Ac5h11	1.20E+06	2.0	-1192.0
7597.	c12h24o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc4h9+Ac5h11	1.00E+04	2.5	9400.0
7598.	c12h24o-EF+h=>h2+c2h3coc6h13+nc3h7	2.40E+08	1.5	2005.0
7599.	c12h24o-EF+oh=>h2o+c2h3coc6h13+nc3h7	1.20E+06	2.0	-1192.0
7600.	c12h24o-EF+ho2=>h2o2+c2h3coc6h13+nc3h7	1.00E+04	2.5	9400.0
7601.	c12h24o-AC+h=>h2+c11h22-1+hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7602.	c12h24o-AC+oh=>h2o+c11h22-1+hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7603.	c12h24o-AC+ho2=>h2o2+c11h22-1+hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7604.	c12h24o-AC+h=>h2+c2h4+c9h19co	2.40E+08	1.5	2005.0
7605.	c12h24o-AC+oh=>h2o+c2h4+c9h19co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7606.	c12h24o-AC+ho2=>h2o2+c2h4+c9h19co	1.00E+04	2.5	9400.0
7607.	c12h24o-BD+h=>h2+ch3co+c10h20-1	2.40E+08	1.5	2005.0
7608.	c12h24o-BD+oh=>h2o+ch3co+c10h20-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
7609.	c12h24o-BD+ho2=>h2o2+ch3co+c10h20-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7610.	c12h24o-BD+h=>h2+c3h6+c8h17co	2.40E+08	1.5	2005.0
7611.	c12h24o-BD+oh=>h2o+c3h6+c8h17co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7612.	c12h24o-BD+ho2=>h2o2+c3h6+c8h17co	1.00E+04	2.5	9400.0
7613.	c12h24o-CE+h=>h2+c9h18-1+c2h5co	2.40E+08	1.5	2005.0
7614.	c12h24o-CE+oh=>h2o+c9h18-1+c2h5co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7615.	c12h24o-CE+ho2=>h2o2+c9h18-1+c2h5co	1.00E+04	2.5	9400.0
7616.	c12h24o-CE+h=>h2+c4h8+c7h15co	2.40E+08	1.5	2005.0
7617.	c12h24o-CE+oh=>h2o+c4h8+c7h15co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7618.	c12h24o-CE+ho2=>h2o2+c4h8+c7h15co	1.00E+04	2.5	9400.0
7619.	c12h24o-DF+h=>h2+c8h16-1+c3h7co	2.40E+08	1.5	2005.0
7620.	c12h24o-DF+oh=>h2o+c8h16-1+c3h7co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7621.	c12h24o-DF+ho2=>h2o2+c8h16-1+c3h7co	1.00E+04	2.5	9400.0
7622.	c12h24o-DF+h=>h2+c5h10+c6h13co	2.40E+08	1.5	2005.0
7623.	c12h24o-DF+oh=>h2o+c5h10+c6h13co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7624.	c12h24o-DF+ho2=>h2o2+c5h10+c6h13co	1.00E+04	2.5	9400.0
7625.	c12h24o-EG+h=>h2+c7h14-1+nc4h9co	2.40E+08	1.5	2005.0
7626.	c12h24o-EG+oh=>h2o+c7h14-1+nc4h9co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7627.	c12h24o-EG+ho2=>h2o2+c7h14-1+nc4h9co	1.00E+04	2.5	9400.0
7628.	c12h24o-EG+h=>h2+c6h12-1+c5h11co	2.40E+08	1.5	2005.0
7629.	c12h24o-EG+oh=>h2o+c6h12-1+c5h11co	1.20E+06	2.0	-1192.0
7630.	c12h24o-EG+ho2=>h2o2+c6h12-1+c5h11co	1.00E+04	2.5	9400.0
7631.	c12h24o-AD+h=>h2+c10h20-1+ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7632.	c12h24o-AD+oh=>h2o+c10h20-1+ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7633.	c12h24o-AD+ho2=>h2o2+c10h20-1+ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7634.	c12h24o-AD+h=>h2+c2h4+nc8h17coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7635.	c12h24o-AD+oh=>h2o+c2h4+nc8h17coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7636.	c12h24o-AD+ho2=>h2o2+c2h4+nc8h17coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7637.	c12h24o-BE+h=>h2+c9h18-1+ch2coch3	2.40E+08	1.5	2005.0
7638.	c12h24o-BE+oh=>h2o+c9h18-1+ch2coch3	1.20E+06	2.0	-1192.0
7639.	c12h24o-BE+ho2=>h2o2+c9h18-1+ch2coch3	1.00E+04	2.5	9400.0
7640.	c12h24o-BE+h=>h2+c3h6+nc7h15coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7641.	c12h24o-BE+oh=>h2o+c3h6+nc7h15coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7642.	c12h24o-BE+ho2=>h2o2+c3h6+nc7h15coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7643.	c12h24o-CF+h=>h2+c8h16-1+c2h5coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7644.	c12h24o-CF+oh=>h2o+c8h16-1+c2h5coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7645.	c12h24o-CF+ho2=>h2o2+c8h16-1+c2h5coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7646.	c12h24o-CF+h=>h2+c4h8+nc6h13coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7647.	c12h24o-CF+oh=>h2o+c4h8+nc6h13coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7648.	c12h24o-CF+ho2=>h2o2+c4h8+nc6h13coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7649.	c12h24o-DG+h=>h2+c7h14-1+nc3h7coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7650.	c12h24o-DG+oh=>h2o+c7h14-1+nc3h7coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7651.	c12h24o-DG+ho2=>h2o2+c7h14-1+nc3h7coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7652.	c12h24o-DG+h=>h2+c5h10+nc5h11coch2	2.40E+08	1.5	2005.0
7653.	c12h24o-DG+oh=>h2o+c5h10+nc5h11coch2	1.20E+06	2.0	-1192.0
7654.	c12h24o-DG+ho2=>h2o2+c5h10+nc5h11coch2	1.00E+04	2.5	9400.0
7655.	c12h24o-AE+h=>h2+c9h18-1+ch2ch2hco	4.80E+08	1.5	2785.0
7656.	c12h24o-AE+oh=>h2o+c9h18-1+ch2ch2hco	2.40E+06	2.0	-1192.0
7657.	c12h24o-AE+ho2=>h2o2+c9h18-1+ch2ch2hco	2.50E+04	2.5	11605.0
7658.	c12h24o-AE+h=>h2+c2h4+nc7h15coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7659.	c12h24o-AE+oh=>h2o+c2h4+nc7h15coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7660.	c12h24o-AE+ho2=>h2o2+c2h4+nc7h15coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7661.	c12h24o-BF+h=>h2+ch3coc2h4p+c8h16-1	2.40E+08	1.5	2005.0
7662.	c12h24o-BF+oh=>h2o+ch3coc2h4p+c8h16-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
7663.	c12h24o-BF+ho2=>h2o2+ch3coc2h4p+c8h16-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7664.	c12h24o-BF+h=>h2+c3h6+nc6h13coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7665.	c12h24o-BF+oh=>h2o+c3h6+nc6h13coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7666.	c12h24o-BF+ho2=>h2o2+c3h6+nc6h13coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7667.	c12h24o-CG+h=>h2+c2h5coc2h4p+c7h14-1	2.40E+08	1.5	2005.0
7668.	c12h24o-CG+oh=>h2o+c2h5coc2h4p+c7h14-1	1.20E+06	2.0	-1192.0
7669.	c12h24o-CG+ho2=>h2o2+c2h5coc2h4p+c7h14-1	1.00E+04	2.5	9400.0
7670.	c12h24o-CG+h=>h2+c4h8+nc5h11coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7671.	c12h24o-CG+oh=>h2o+c4h8+nc5h11coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7672.	c12h24o-CG+ho2=>h2o2+c4h8+nc5h11coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7673.	c12h24o-DH+h=>h2+c6h12-1+nc3h7coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7674.	c12h24o-DH+oh=>h2o+c6h12-1+nc3h7coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7675.	c12h24o-DH+ho2=>h2o2+c6h12-1+nc3h7coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7676.	c12h24o-DH+h=>h2+c5h10+nc4h9coc2h4p	2.40E+08	1.5	2005.0
7677.	c12h24o-DH+oh=>h2o+c5h10+nc4h9coc2h4p	1.20E+06	2.0	-1192.0
7678.	c12h24o-DH+ho2=>h2o2+c5h10+nc4h9coc2h4p	1.00E+04	2.5	9400.0
7679.	c12h24-1=ac3h5+Ac9h19	2.50E+16	0.0	70000.0
7680.	c12h24-1=Dc4h7-1+Ac8h17	1.00E+16	0.0	71000.0
7681.	c12h24-1=Ec5h9-1+Ac7h15	1.00E+16	0.0	71000.0
7682.	c12h24-1=Fc6h11-1+Ac6h13	1.00E+16	0.0	71000.0
7683.	c12h24-1=Gc7h13-1+Ac5h11	1.00E+16	0.0	71000.0
7684.	c12h24-1+ho2=>oh+ch2o+c11h22-1	2.50E+12	1.0	25000.0
7685.	c12h24-2+ho2=>oh+ch3hco+c10h20-1	2.50E+12	1.0	25000.0
7686.	c12h24-2+ho2=>oh+c2h4+c9h19hco	2.50E+12	1.0	25000.0
7687.	c12h24-3+ho2=>oh+ethco+c9h18-1	2.50E+12	1.0	25000.0
7688.	c12h24-3+ho2=>oh+c3h6+c8h17hco	2.50E+12	1.0	25000.0
7689.	c12h24-4+ho2=>oh+nc3h7hco+c8h16-1	2.50E+12	1.0	25000.0
7690.	c12h24-4+ho2=>oh+c4h8+c7h15hco	2.50E+12	1.0	25000.0
7691.	c12h24-5+ho2=>oh+c7h14-1+nc4h9hco	2.50E+12	1.0	25000.0
7692.	c12h24-5+ho2=>oh+c5h10+c6h13hco	2.50E+12	1.0	25000.0
7693.	c12h24-6+ho2=>oh+c6h12-1+c5h11hco	5.00E+12	1.0	25000.0
7694.	c12h24-1+oh=ch2o+Ac11h23	1.40E+12	0.0	-900.0
7695.	c12h24-2+oh=ch3hco+Ac10h21	1.40E+12	0.0	-900.0
7696.	c12h24-2+oh=c2h5+c9h19hco	1.40E+12	0.0	-900.0

7697. c12h24-3+oh=ethco+Ac9h19 1.40E+12 0.0 -900.0
7698. c12h24-3+oh=nc3h7+c8h17hco 1.40E+12 0.0 -900.0
7699. c12h24-4+oh=nc3h7hco+Ac8h17 1.40E+12 0.0 -900.0
7700. c12h24-4+oh=pc4h9+c7h15hco 1.40E+12 0.0 -900.0
7701. c12h24-5+oh=Ac7h15+nc4h9hco 1.40E+12 0.0 -900.0
7702. c12h24-5+oh=Ac5h11+c6h13hco 1.40E+12 0.0 -900.0
7703. c12h24-6+oh=Ac6h13+c5h11hco 2.80E+12 0.0 -900.0
7704. c12h24-1+o=ch2o+c11h22-1 3.40E+07 1.8 550.0
7705. c12h24-2+o=ch3hco+c10h20-1 3.40E+07 1.8 550.0
7706. c12h24-2+o=c2h4+c9h19hco 3.40E+07 1.8 550.0
7707. c12h24-3+o=ethco+c9h18-1 3.40E+07 1.8 550.0
7708. c12h24-3+o=c3h6+c8h17hco 3.40E+07 1.8 550.0
7709. c12h24-4+o=nc3h7hco+c8h16-1 3.40E+07 1.8 550.0
7710. c12h24-4+o=c4h8+c7h15hco 3.40E+07 1.8 550.0
7711. c12h24-5+o=c7h14-1+nc4h9hco 3.40E+07 1.8 550.0
7712. c12h24-5+o=c5h10+c6h13hco 3.40E+07 1.8 550.0
7713. c12h24-6+o=c6h12-1+c5h11hco 6.80E+07 1.8 550.0
7714. c12h24-1+ho2=oh+c12h24o-AB 1.00E+12 0.0 14400.0
7715. c12h24-2+ho2=oh+c12h24o-BC 1.00E+12 0.0 14400.0
7716. c12h24-3+ho2=oh+c12h24o-CD 1.00E+12 0.0 14400.0
7717. c12h24-4+ho2=oh+c12h24o-DE 1.00E+12 0.0 14400.0
7718. c12h24-5+ho2=oh+c12h24o-EF 1.00E+12 0.0 14400.0
7719. c12h24-6+ho2=oh+c12h24o-FG 1.00E+12 0.0 14400.0
7720. c12h24-1+h=h2+Cc12h23-1 1.70E+05 2.5 2490.0
7721. c12h24-1+oh=h2o+Cc12h23-1 3.10E+06 2.0 -300.0
7722. c12h24-1+ho2=h2o2+Cc12h23-1 6.80E+03 2.5 10115.0
7723. c12h24-1+ch3=ch4+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 5675.0
7724. c12h24-1+ch3o2=ch3o2h+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 5675.0
7725. c12h24-1+c2h5=c2h6+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 6835.0
7726. c12h24-1+o=oh+Cc12h23-1 6.00E+10 0.7 7682.0
7727. c12h24-2+h=h2+Cc12h23-1 1.70E+05 2.5 2490.0
7728. c12h24-2+oh=h2o+Cc12h23-1 3.10E+06 2.0 -300.0
7729. c12h24-2+ho2=h2o2+Cc12h23-1 6.80E+03 2.5 10115.0
7730. c12h24-2+ch3=ch4+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 5675.0
7731. c12h24-2+ch3o2=ch3o2h+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 5675.0
7732. c12h24-2+c2h5=c2h6+Cc12h23-1 2.20E+00 3.5 6835.0
7733. c12h24-2+o=oh+Cc12h23-1 6.00E+10 0.7 7682.0
7734. c12h24-2+h=h2+Dc12h23-2 1.70E+05 2.5 2490.0
7735. c12h24-2+oh=h2o+Dc12h23-2 3.10E+06 2.0 -300.0
7736. c12h24-2+ho2=h2o2+Dc12h23-2 6.80E+03 2.5 10115.0
7737. c12h24-2+ch3=ch4+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 5675.0
7738. c12h24-2+ch3o2=ch3o2h+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 5675.0
7739. c12h24-2+c2h5=c2h6+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 6835.0
7740. c12h24-2+o=oh+Dc12h23-2 6.00E+10 0.7 7682.0
7741. c12h24-3+h=h2+Dc12h23-2 1.70E+05 2.5 2490.0
7742. c12h24-3+oh=h2o+Dc12h23-2 3.10E+06 2.0 -300.0
7743. c12h24-3+ho2=h2o2+Dc12h23-2 6.80E+03 2.5 10115.0
7744. c12h24-3+ch3=ch4+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 5675.0
7745. c12h24-3+ch3o2=ch3o2h+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 5675.0
7746. c12h24-3+c2h5=c2h6+Dc12h23-2 2.20E+00 3.5 6835.0
7747. c12h24-3+o=oh+Dc12h23-2 6.00E+10 0.7 7682.0
7748. c12h24-3+h=h2+Ec12h23-3 1.70E+05 2.5 2490.0
7749. c12h24-3+oh=h2o+Ec12h23-3 3.10E+06 2.0 -300.0
7750. c12h24-3+ho2=h2o2+Ec12h23-3 6.80E+03 2.5 10115.0
7751. c12h24-3+ch3=ch4+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 5675.0
7752. c12h24-3+ch3o2=ch3o2h+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 5675.0
7753. c12h24-3+c2h5=c2h6+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 6835.0
7754. c12h24-3+o=oh+Ec12h23-3 6.00E+10 0.7 7682.0
7755. c12h24-4+h=h2+Ec12h23-3 1.70E+05 2.5 2490.0
7756. c12h24-4+oh=h2o+Ec12h23-3 3.10E+06 2.0 -300.0
7757. c12h24-4+ho2=h2o2+Ec12h23-3 6.80E+03 2.5 10115.0
7758. c12h24-4+ch3=ch4+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 5675.0
7759. c12h24-4+ch3o2=ch3o2h+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 5675.0
7760. c12h24-4+c2h5=c2h6+Ec12h23-3 2.20E+00 3.5 6835.0
7761. c12h24-4+o=oh+Ec12h23-3 6.00E+10 0.7 7682.0
7762. c12h24-4+h=h2+Fc12h23-4 1.70E+05 2.5 2490.0
7763. c12h24-4+oh=h2o+Fc12h23-4 3.10E+06 2.0 -300.0
7764. c12h24-4+ho2=h2o2+Fc12h23-4 6.80E+03 2.5 10115.0
7765. c12h24-4+ch3=ch4+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 5675.0
7766. c12h24-4+ch3o2=ch3o2h+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 5675.0
7767. c12h24-4+c2h5=c2h6+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 6835.0
7768. c12h24-4+o=oh+Fc12h23-4 6.00E+10 0.7 7682.0
7769. c12h24-5+h=h2+Fc12h23-4 1.70E+05 2.5 2490.0
7770. c12h24-5+oh=h2o+Fc12h23-4 3.10E+06 2.0 -300.0
7771. c12h24-5+ho2=h2o2+Fc12h23-4 6.80E+03 2.5 10115.0
7772. c12h24-5+ch3=ch4+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 5675.0
7773. c12h24-5+ch3o2=ch3o2h+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 5675.0
7774. c12h24-5+c2h5=c2h6+Fc12h23-4 2.20E+00 3.5 6835.0
7775. c12h24-5+o=oh+Fc12h23-4 6.00E+10 0.7 7682.0
7776. c12h24-5+h=h2+Gc12h23-5 1.70E+05 2.5 2490.0
7777. c12h24-5+oh=h2o+Gc12h23-5 3.10E+06 2.0 -300.0
7778. c12h24-5+ho2=h2o2+Gc12h23-5 6.80E+03 2.5 10115.0
7779. c12h24-5+ch3=ch4+Gc12h23-5 2.20E+00 3.5 5675.0
7780. c12h24-5+ch3o2=ch3o2h+Gc12h23-5 2.20E+00 3.5 5675.0
7781. c12h24-5+c2h5=c2h6+Gc12h23-5 2.20E+00 3.5 6835.0
7782. c12h24-5+o=oh+Gc12h23-5 6.00E+10 0.7 7682.0
7783. c12h24-6+h=h2+Gc12h23-5 3.40E+05 2.5 2490.0
7784. c12h24-6+oh=h2o+Gc12h23-5 6.20E+06 2.0 -300.0
7785. c12h24-6+ho2=h2o2+Gc12h23-5 6.80E+03 2.5 10115.0
7786. c12h24-6+ch3=ch4+Gc12h23-5 4.40E+00 3.5 5675.0
7787. c12h24-6+ch3o2=ch3o2h+Gc12h23-5 4.40E+00 3.5 5675.0
7788. c12h24-6+c2h5=c2h6+Gc12h23-5 4.40E+00 3.5 6835.0
7789. c12h24-6+o=oh+Gc12h23-5 1.20E+11 0.7 7682.0
7790. c12h24-1+oh=c12h24rBohA 2.76E+12 0.0 -1042.0
7791. c12h24rBohA+o2=c12h24qjBohA 1.00E+12 0.0 -1100.0
7792. c12h24qjBohA=>oh+ch2o+c10h21hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7793. c12h24-2+oh=c12h24rCohB 2.76E+12 0.0 -1042.0
7794. c12h24rCohB+o2=c12h24qjCohB 1.00E+12 0.0 -1100.0
7795. c12h24qjCohB=>oh+ch3hco+c9h19hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7796. c12h24-3+oh=c12h24rDohC 2.76E+12 0.0 -1042.0
7797. c12h24rDohC+o2=c12h24qjDohC 1.00E+12 0.0 -1100.0
7798. c12h24qjDohC=>oh+ethco+c8h17hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7799. c12h24-4+oh=c12h24rEohD 2.76E+12 0.0 -1042.0
7800. c12h24rEohD+o2=c12h24qjEohD 1.00E+12 0.0 -1100.0
7801. c12h24qjEohD=>oh+nc3h7hco+c7h15hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7802. c12h24-5+oh=c12h24rFohE 2.76E+12 0.0 -1042.0
7803. c12h24rFohE+o2=c12h24qjFohE 1.00E+12 0.0 -1100.0
7804. c12h24qjFohE=>oh+nc4h9hco+c6h13hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7805. c12h24-6+oh=c12h24rGohF 2.76E+12 0.0 -1042.0
7806. c12h24rGohF+o2=c12h24qjGohF 1.00E+12 0.0 -1100.0
7807. c12h24qjGohF=>oh+2c5h11hco 1.00E+12 0.0 28680.0
7808. Cc12h23-1=c4h6+Ac8h17 1.34E+15 -0.5 38320.0
7809. Dc12h23-2=c5h8-13+Ac7h15 2.50E+13 0.0 35000.0
7810. Ec12h23-3=c6h10-13+Ac6h13 2.50E+13 0.0 35000.0
7811. Fc12h23-4=c7h12-13+Ac5h11 2.50E+13 0.0 35000.0
7812. Gc12h23-5=c8h14-13+pc4h9 2.50E+13 0.0 35000.0
7813. c11h20-13=c5h7+Ac6h13 1.00E+16 0.0 71000.0
7814. c10h18-13=c5h7+Ac5h11 1.00E+16 0.0 71000.0
7815. c9h16-13=c5h7+pc4h9 1.00E+16 0.0 71000.0
7816. c8h14-13=c5h7+nc3h7 1.00E+16 0.0 71000.0
7817. cyc6h9+o2=chxe1qjC 2.43E+39 -9.0 8620.0
7818. chxe1qjC=Echxe1qC 2.14E+09 1.0 28226.6
7819. Echxe1qC+o2=chxe1qCqjE 1.84E+45 -11.1 6538.0
7820. chxe1qCqjE=chxe1oCqE+oh 1.07E+09 1.0 26226.6
7821. oh+chxe1oCojE=chxe1oCqE 1.81E+13 0.0 0.0
7822. Dc6e5oAoC=chxe1oCojE 1.00E+08 0.9 5900.0
7823. Fc6e3oAoE=chxe1oCojE 1.00E+08 0.9 5900.0
7824. Dc6e5oAoC+o=acrol+hcoch2co 2.00E+14 0.0 0.0
7825. Dc6e5oAoC+ho2=oh+acrol+hcoch2co 1.00E+13 0.0 0.0
7826. ch2co+ac3h4hco1=Fc6e3oAoE 2.00E+11 0.0 2010.0
7827. cyc6h11+o2=chxqjA 1.50E+09 0.0 0.0
7828. chxqjA=cyc6h10+ho2 2.85E+12 0.0 29000.0
7829. chxqjA=chxqArC 4.28E+09 1.0 28226.6
7830. chxqArC=chxo-AC+oh 1.40E+12 0.0 20000.0
7831. chxqArC+o2=chxqAqjC 1.84E+45 -11.1 6538.0
7832. chxqAqjC=oh+chxoAqC 1.07E+09 1.0 24365.9
7833. chxqAqjC=chxqAqCrE 2.14E+09 1.0 28226.6
7834. chxoAqC=chxoAojC+oh 1.50E+16 0.0 42000.0
7835. Fc6oAoC=chxoAojC 1.00E+08 0.9 5900.0
7836. c2h4+ch2coch2hco=Fc6oAoC 1.32E+04 2.5 6130.0
7837. ch2co+ch2hco=ch2coch2hco 1.76E+04 2.5 6130.0
7838. Fc6oAoE=chxoAojC 1.00E+08 0.9 5900.0
7839. ch2co+c3h6cho-1=Fc6oAoE 1.32E+04 2.5 6130.0
7840. c6e5oAqC+oh=chxqAqCrE 4.76E+07 1.5 34700.0
7841. c6e5oAojC+oh=c6e5oAqC 1.81E+13 0.0 0.0
7842. ac3h5hco+ch2hco=c6e5oAojC 1.00E+11 0.0 3496.0
7843. chxo-AC+oh=Cchxone+h2o 3.40E+06 1.9 -1451.0
7844. chxo-AC+h=Cchxone+h2 1.20E+06 2.4 2583.0
7845. chxo-AC+ch3=Cchxone+ch4 1.79E+04 2.3 6147.0
7846. chxo-AC+ho2=Cchxone+h2o2 3.00E+04 2.5 12260.0
7847. Bchxone+o2=chxoqjB 2.43E+39 -9.0 8620.0
7848. chxoqjB=DchxoqB 3.72E+11 0.0 24076.6
7849. DchxoqB+o2=chxoqBqjD 7.54E+12 0.0 0.0
7850. DchxoqB=c6e5oAoB+oh 5.50E+13 0.0 25500.0
7851. chxoqBqjD=chxoAoBqD+oh 1.00E+16 0.0 43000.0
7852. chxoAoBqD=chxoAoBojD+oh 1.00E+16 0.0 43000.0
7853. Fc6oAoDoE=chxoAoBojD 1.00E+08 0.9 5900.0
7854. Fc6oAoCoD=chxoAoBojD 1.00E+08 0.9 5900.0
7855. Fc6oAoDoE=ch2co+choch2ch2co 2.00E+13 0.0 21350.0
7856. Fc6oAoCoD=c2h4+2co+ch2hco 2.00E+13 0.0 28700.0
7857. c6e5oAoB+oh=c6e5oyAoB+h2o 2.30E+10 0.7 -1100.0
7858. c6e5oAoB+h=c6e5oyAoB+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
7859. c6e5oAoB+ho2=c6e5oyAoB+h2o2 3.00E+12 0.0 12000.0
7860. c6e5oAoB+ch3=c6e5oyAoB+ch4 7.60E+00 3.4 3740.0
7861. c6e5oAoB+o2=c6e5oyAoB+ho2 3.00E+13 0.0 39200.0
7862. c6e5oyAoB=c4h7co-1+co 2.00E+13 0.0 28700.0
7863. c6e5oyAoB+ho2=>c4h7co-1+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
7864. c6e5oA+oh=c6e5oyA+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
7865. c6e5oA+h=c6e5oyA+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
7866. c6e5oA+ho2=c6e5oyA+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
7867. c6e5oyA=Ec5h9-1+co 2.00E+13 0.0 28700.0
7868. c6e5oyA+ho2=>Ec5h9-1+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
7869. c6e5oA+oh=h2o+c4h6+ch2hco 1.41E+07 1.8 974.0
7870. c6e5oA+ho2=h2o2+c4h6+ch2hco 1.20E+13 0.0 19400.0
7871. c6e5oA+ch3=ch4+c4h6+ch2hco 1.30E+12 0.0 11600.0
7872. c6e5oA+h=h2+c4h6+ch2hco 5.70E+07 2.0 7700.0
7873. c6e5oA+o=oh+c4h6+ch2hco 4.36E+06 2.4 5500.0
7874. phc3h4+nc3h7o2=Cophc3h4-1+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
7875. phc3h4+nc3h7o2=Aophc3h4-2+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
7876. phc3h4+ic3h7o2=Cophc3h4-1+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
7877. phc3h4+ic3h7o2=Aophc3h4-2+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
7878. hoco+m=co2+h+m 1.49E+14 0.1 36463.0
7879. c10h21qA+phch2=c10h21qjA+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
7880. c10h21qB+phch2=c10h21qjB+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
7881. c10h21qC+phch2=c10h21qjC+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
7882. c10h21qD+phch2=c10h21qjD+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
7883. c10h21qE+phch2=c10h21qjE+toluen 1.05E+11 0.0 9500.0
7884. pch=c2h5+mchA 6.50E+16 0.0 84000.0
7885. pch=ch3+echA 6.50E+16 0.0 85000.0
7886. pch=nc3h7+cyc6h11 6.50E+16 0.0 84000.0
7887. pch=>c2h4+c2h4+c5h10 1.30E+17 0.0 84000.0
7888. pch=>c2h4+nc3h7+Dc4h7-1 1.30E+17 0.0 84000.0
7889. pch=>3c2h4+c3h6 1.30E+17 0.0 84000.0
7890. pch=pchA+h 9.00E+15 0.0 100220.0
7891. pch=pchB+h 6.00E+15 0.0 99120.0
7892. pch=pchC+h 6.00E+15 0.0 99120.0
7893. pch=pchD+h 3.00E+15 0.0 99520.0
7894. pch=pchE+h 6.00E+15 0.0 99520.0
7895. pch=pchF+h 6.00E+15 0.0 99520.0
7896. pch=pchG+h 6.00E+15 0.0 99520.0
7897. pch+o2=pchA+ho2 2.10E+13 0.0 50610.0
7898. pch+o2=pchB+ho2 1.40E+13 0.0 49510.0
7899. pch+o2=pchC+ho2 1.40E+13 0.0 49510.0
7900. pch+o2=pchD+ho2 7.00E+11 0.0 49910.0
7901. pch+o2=pchE+ho2 1.40E+13 0.0 49910.0
7902. pch+o2=pchF+ho2 1.40E+13 0.0 49910.0
7903. pch+o2=pchG+ho2 1.40E+13 0.0 49910.0
7904. pch+oh=pchA+h2o 3.16E+07 1.8 934.0
7905. pch+oh=pchB+h2o 3.00E+09 1.0 260.0
7906. pch+oh=pchC+h2o 3.00E+09 1.0 260.0
7907. pch+oh=pchD+h2o 5.50E+12 0.0 790.0
7908. pch+oh=pchE+h2o 1.10E+13 0.0 790.0
7909. pch+oh=pchF+h2o 1.10E+13 0.0 790.0
7910. pch+oh=pchG+h2o 5.50E+12 0.0 790.0
7911. pch+ho2=pchA+h2o2 2.38E+04 2.5 16494.0
7912. pch+ho2=pchB+h2o2 9.64E+03 2.6 13910.0
7913. pch+ho2=pchC+h2o2 9.64E+03 2.6 13910.0
7914. pch+ho2=pchD+h2o2 3.61E+03 2.5 10532.0
7915. pch+ho2=pchE+h2o2 1.93E+04 2.6 13910.0
7916. pch+ho2=pchF+h2o2 1.93E+04 2.6 13910.0
7917. pch+ho2=pchG+h2o2 9.64E+03 2.6 13910.0
7918. pch+h=pchA+h2 6.68E+05 2.5 6756.0
7919. pch+h=pchB+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
7920. pch+h=pchC+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
7921. pch+h=pchD+h2 6.02E+05 2.4 2583.0
7922. pch+h=pchE+h2 2.60E+06 2.4 4471.0
7923. pch+h=pchF+h2 2.60E+06 2.4 4471.0
7924. pch+h=pchG+h2 1.30E+06 2.4 4471.0
7925. pch+o=pchA+oh 1.88E+06 2.4 5505.0
7926. pch+o=pchB+oh 5.50E+05 2.5 3140.0
7927. pch+o=pchC+oh 5.50E+05 2.5 3140.0
7928. pch+o=pchD+oh 3.83E+05 2.4 1140.0
7929. pch+o=pchE+oh 1.10E+06 2.5 2830.0
7930. pch+o=pchF+oh 1.10E+06 2.5 2830.0
7931. pch+o=pchG+oh 5.51E+05 2.5 2830.0
7932. pch+ch3=pchA+ch4 1.50E+12 0.0 11710.0
7933. pch+ch3=pchB+ch4 8.07E+11 0.0 10110.0
7934. pch+ch3=pchC+ch4 8.07E+11 0.0 10110.0
7935. pch+ch3=pchD+ch4 6.01E-10 6.4 893.0
7936. pch+ch3=pchE+ch4 3.02E+00 3.5 5481.0
7937. pch+ch3=pchF+ch4 3.02E+00 3.5 5481.0
7938. pch+ch3=pchG+ch4 1.51E+00 3.5 5481.0
7939. pch+c2h5=pchA+c2h6 4.52E-01 3.6 9141.0
7940. pch+c2h5=pchB+c2h6 1.21E+00 3.5 7472.0

7941. pch+c2h5=pchC+c2h6 1.21E+00 3.5 7472.0
7942. pch+c2h5=pchD+c2h6 6.01E-10 6.4 893.0
7943. pch+c2h5=pchE+c2h6 3.02E+00 3.5 5481.0
7944. pch+c2h5=pchF+c2h6 3.02E+00 3.5 5481.0
7945. pch+c2h5=pchG+c2h6 1.51E+00 3.5 5481.0
7946. pch+c2h3=pchA+c2h4 3.00E+02 3.3 10502.0
7947. pch+c2h3=pchB+c2h4 1.00E+03 3.1 8829.0
7948. pch+c2h3=pchC+c2h4 1.00E+03 3.1 8829.0
7949. pch+c2h3=pchD+c2h4 6.01E-10 6.4 893.0
7950. pch+c2h3=pchE+c2h4 3.02E+00 3.5 5481.0
7951. pch+c2h3=pchF+c2h4 3.02E+00 3.5 5481.0
7952. pch+c2h3=pchG+c2h4 1.51E+00 3.5 5481.0
7953. pch+ac3h5=pchA+c3h6 2.18E+02 3.3 19852.0
7954. pch+ac3h5=pchB+c3h6 7.87E+01 3.3 18163.0
7955. pch+ac3h5=pchC+c3h6 7.87E+01 3.3 18163.0
7956. pch+ac3h5=pchD+c3h6 6.01E-10 6.4 893.0
7957. pch+ac3h5=pchE+c3h6 3.02E+00 3.5 5481.0
7958. pch+ac3h5=pchF+c3h6 3.02E+00 3.5 5481.0
7959. pch+ac3h5=pchG+c3h6 1.51E+00 3.5 5481.0
7960. pch+sc3h5=pchA+c3h6 2.18E+02 3.3 19852.0
7961. pch+hco=pchA+ch2o 1.02E+05 2.5 18441.0
7962. pch+hco=pchB+ch2o 1.08E+07 1.9 17010.0
7963. pch+hco=pchC+ch2o 1.08E+07 1.9 17010.0
7964. pch+hco=pchD+ch2o 2.25E+11 0.0 9540.0
7965. pch+hco=pchE+ch2o 4.50E+11 0.0 9540.0
7966. pch+hco=pchF+ch2o 4.50E+11 0.0 9540.0
7967. pch+hco=pchG+ch2o 2.25E+11 0.0 9540.0
7968. pch+ch3o=pchA+ch3oh 1.59E+11 0.0 7050.0
7969. pch+ch3o=pchB+ch3oh 7.20E+10 0.0 4470.0
7970. pch+ch3o=pchC+ch3oh 7.20E+10 0.0 4470.0
7971. pch+ch3o=pchD+ch3oh 2.29E+10 0.0 2873.0
7972. pch+ch3o=pchE+ch3oh 2.90E+11 0.0 4571.0
7973. pch+ch3o=pchF+ch3oh 2.90E+11 0.0 4571.0
7974. pch+ch3o=pchG+ch3oh 1.45E+11 0.0 4571.0
7975. pchA=mchA+c2h4 2.00E+13 0.0 42000.0
7976. pchB=cyc6h11+c3h6 2.00E+13 0.0 42000.0
7977. pchC=eche1+ch3 2.00E+13 0.0 45000.0
7978. pchC=>c2h4+c2h4+Cc5h9-1 2.00E+13 0.0 42000.0
7979. pchD=c2h5+mche1 2.00E+13 0.0 42000.0
7980. pchE=cyc6h10+nc3h7 5.00E+12 0.0 39500.0
7981. pchD=>c2h4+P2c4h614 2.00E+13 0.0 45000.0
7982. pchE=>c2h4+c4h6+nc3h7 2.00E+13 0.0 44000.0
7983. pchF=>c5h10+Dc4h7-1 1.00E+13 0.0 50000.0
7984. pchF=>c2h5+c7h12-16 2.00E+13 0.0 45000.0
7985. pchF=>c2h4+Dc7h13-1 2.00E+13 0.0 45000.0
7986. pchG=>c5h10+Dc4h7-1 2.00E+13 0.0 50000.0
7987. pchG=>nc3h7+c6h10-15 2.00E+13 0.0 45000.0
7988. pchA=pche1+h 2.40E+13 0.0 36450.0
7989. pchB=pche1+h 3.60E+13 0.0 36050.0
7990. pchB=pche2+h 2.40E+13 0.0 33250.0
7991. pchC=pche2+h 2.40E+13 0.0 33250.0
7992. pchC=pche3+h 1.20E+13 0.0 30370.0
7993. pchD=pche3+h 2.40E+13 0.0 29970.0
7994. pchD=pche4+h 4.80E+13 0.0 31690.0
7995. pchE=pche4+h 1.20E+13 0.0 31690.0
7996. pchE=pche5+h 2.40E+13 0.0 32625.0
7997. pchF=pche5+h 2.40E+13 0.0 32625.0
7998. pchF=pche6+h 2.40E+13 0.0 32965.0
7999. pchG=pche6+h 4.80E+13 0.0 32965.0
8000. pchA+o2=pche1+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8001. pchB+o2=pche1+ho2 2.85E+12 0.0 5000.0

8002. pchB+o2=pche2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8003. pchC+o2=pche2+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8004. pchC+o2=pche3+ho2 9.50E+11 0.0 5000.0
8005. pchD+o2=pche3+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8006. pchD+o2=pche4+ho2 3.80E+12 0.0 5000.0
8007. pchE+o2=pche4+ho2 9.50E+11 0.0 5000.0
8008. pchE+o2=pche5+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8009. pchF+o2=pche5+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8010. pchF+o2=pche6+ho2 1.90E+12 0.0 5000.0
8011. pchG+o2=pche6+ho2 3.80E+12 0.0 5000.0
8012. pchA+o=ch2o+echA 2.00E+13 0.0 4000.0
8013. pchB+o=ch3hco+mchA 2.00E+13 0.0 4000.0
8014. pchB+o=ch3+echoA 2.00E+13 0.0 4000.0
8015. pchC+o=ethco+cyc6h11 2.00E+13 0.0 4000.0
8016. pchC+o=c2h5+mchoA 2.00E+13 0.0 4000.0
8017. pchD+o=nc3h7+chxone 2.00E+13 0.0 4000.0
8018. pchE+o=>c5h10+c2h4+ch2hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8019. pchE+o=>2c2h4+c2h5+acrol 2.00E+13 0.0 4000.0
8020. pchF+o=>c5h10+c2h4+ch2hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8021. pchF+o=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7 2.00E+13 0.0 4000.0
8022. pchG+o=>c5h10+c2h4+ch2hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8023. pchA+oh=ch2o+ech 2.00E+13 0.0 4000.0
8024. pchB+oh=ch3hco+mch 2.00E+13 0.0 4000.0
8025. pchB+oh=ch4+echoA 2.00E+13 0.0 4000.0
8026. pchC+oh=ethco+cyc6h12 2.00E+13 0.0 4000.0
8027. pchC+oh=c2h6+mchoA 2.00E+13 0.0 4000.0
8028. pchD+oh=c3h8+chxone 2.00E+13 0.0 4000.0
8029. pchE+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8030. pchE+oh=>2c2h4+c2h6+acrol 2.00E+13 0.0 4000.0
8031. pchF+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8032. pchF+oh=>ac3h5hco+c2h4+c3h8 2.00E+13 0.0 4000.0
8033. pchG+oh=>c5h10+c2h4+ch3hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8034. pchA+ho2=>ch2o+echA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8035. pchB+ho2=>ch3hco+mchA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8036. pchB+ho2=>ch3+echoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8037. pchC+ho2=>ethco+cyc6h11+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8038. pchC+ho2=>c2h5+mchoA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8039. pchD+ho2=>nc3h7+chxone+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8040. pchE+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8041. pchE+ho2=>2c2h4+c2h5+acrol+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8042. pchF+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8043. pchF+ho2=>ac3h5hco+c2h4+nc3h7+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8044. pchG+ho2=>c5h10+c2h4+ch2hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8045. pchE=pchB 4.00E+11 0.0 16100.0
8046. pchG=pchB 2.00E+11 0.0 18100.0
8047. pchD=pchA 6.20E+09 0.6 26190.0
8048. pchE=pchA 4.00E+11 0.0 11100.0
8049. pchF=pchA 4.00E+11 0.0 18100.0
8050. pchF=pchC 4.00E+11 0.0 18100.0
8051. pchG=pchC 4.00E+11 0.0 11100.0
8052. pchA+ho2=pchojA+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8053. pchB+ho2=pchojB+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8054. pchC+ho2=pchojC+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8055. pchD+ho2=pchojD+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8056. pchE+ho2=pchojE+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8057. pchF+ho2=pchojF+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8058. pchG+ho2=pchojG+oh 7.00E+12 0.0 -1000.0
8059. pchA+ch3o2=pchojA+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8060. pchB+ch3o2=pchojB+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8061. pchC+ch3o2=pchojC+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8062. pchD+ch3o2=pchojD+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0

8063. pchE+ch3o2=pchojE+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8064. pchF+ch3o2=pchojF+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8065. pchG+ch3o2=pchojG+ch3o 7.00E+12 0.0 -1000.0
8066. pchojA=ch2o+echA 1.00E+15 0.0 21600.0
8067. pchojB=ch3hco+mchA 7.94E+14 0.0 15300.0
8068. pchojB=ch3+echoA 7.94E+14 0.0 15300.0
8069. pchojC=ethco+cyc6h11 7.94E+14 0.0 15300.0
8070. pchojC=c2h5+mchoA 7.94E+14 0.0 15300.0
8071. pchojD=nc3h7+chxone 7.94E+14 0.0 15300.0
8072. pchojG=EtDc7oArI 7.94E+14 0.0 15300.0
8073. pchojF=EtDc7oIrA 7.94E+14 0.0 15300.0
8074. pchojF=MeEc8oArI 7.94E+14 0.0 15300.0
8075. pchojE=MeEc8oIrA 7.94E+14 0.0 15300.0
8076. pchojE=Fc9oA 7.94E+14 0.0 15300.0
8077. EtDc7oArI=c2h4+ch2hco+c5h10 2.00E+13 0.0 27750.0
8078. EtDc7oArI=c2h4+c2h5+c4h7hco-1 2.00E+13 0.0 27750.0
8079. EtDc7oArI+o2=EtDc7oAqjI 4.82E+36 -8.2 5167.0
8080. EtDc7oAqjI=DEtDc7oAqI 2.88E+08 1.0 22000.0
8081. DEtDc7oAqI+o2=EtDc7oAqIqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
8082. EtDc7oAqIqjD=oh+EtDc7oAoIqD 2.88E+08 1.0 26000.0
8083. EtDc7oAoIqD=oh+c6oAoC+ch2ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8084. EtDc7oAoIqD=oh+c7oAoD+ch2hco 1.00E+16 0.0 43000.0
8085. EtDc7oIrA=c2h4+ch2hco+c5h10 2.00E+13 0.0 28140.0
8086. EtDc7oIrA=c2h4+nc3h7+ac3h5hco 2.00E+13 0.0 36400.0
8087. EtDc7oIrA+o2=EtDc7oIqjA 1.84E+45 -11.1 6538.0
8088. EtDc7oIqjA=CEtDc7oIqA 5.75E+08 1.0 25000.0
8089. EtDc7oIqjA=DEtDc7oIqA 4.94E+07 1.0 19000.0
8090. CEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjC 4.82E+36 -8.2 5167.0
8091. DEtDc7oIqA+o2=EtDc7oIqAqjD 4.82E+36 -8.2 5167.0
8092. EtDc7oIqAqjC=oh+EtDc7oAoIqC 5.75E+08 1.0 26000.0
8093. EtDc7oIqAqjD=oh+EtDc7oAoIqD 9.89E+07 1.0 23000.0
8094. EtDc7oAoIqC=oh+hcoch2hco+Cc6oA 1.00E+16 0.0 43000.0
8095. EtDc7oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG 1.00E+16 0.0 43000.0
8096. MeEc8oArI=ch2ch2ch2hco+c5h10 2.00E+13 0.0 29200.0
8097. MeEc8oArI=c6e5oA+nc3h7 2.00E+13 0.0 33750.0
8098. MeEc8oArI+o2=MeEc8oAqjI 1.84E+45 -11.1 6538.0
8099. MeEc8oAqjI=DMeEc8oAqI 5.75E+08 1.0 25000.0
8100. MeEc8oAqjI=FMeEc8oAqI 5.75E+08 1.0 25000.0
8101. DMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjD 4.82E+36 -8.2 5167.0
8102. FMeEc8oAqI+o2=MeEc8oAqIqjF 4.82E+36 -8.2 5167.0
8103. MeEc8oAqIqjD=oh+MeEc8oAoIqD 5.75E+08 1.0 26000.0
8104. MeEc8oAqIqjF=oh+MeEc8oAoIqF 5.75E+08 1.0 26000.0
8105. MeEc8oAoIqD=oh+ch2ch2hco+MeBc5oAoF 1.00E+16 0.0 43000.0
8106. MeEc8oAoIqD=oh+choch2ch2cho+acrol+c2h5 1.00E+16 0.0 43000.0
8107. MeEc8oAoIqF=oh+ethco+Bc6oAoF 1.00E+16 0.0 43000.0
8108. acrol+ch2ch2hco=Bc6oAoF 1.50E+11 0.0 7200.0
8109. MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoG 4.20E+12 0.0 500.0
8110. MeCc6oAoG+h=>h2+MeCc6oyAoG 4.00E+13 0.0 4200.0
8111. MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoG 1.00E+12 0.0 10000.0
8112. MeCc6oyAoG=>co+acrol+nc3h7 2.00E+13 0.0 28700.0
8113. MeCc6oyAoG+ho2=>oh+co2+acrol+nc3h7 2.00E+13 0.0 0.0
8114. MeCc6oAoG+oh=>h2o+MeCc6oAoyG 4.20E+12 0.0 500.0
8115. MeCc6oAoG+h=>h2+MeCc6oAoyG 4.00E+13 0.0 4200.0
8116. MeCc6oAoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoyG 1.00E+12 0.0 10000.0
8117. MeCc6oAoyG=>co+Cc6oA 2.00E+13 0.0 28700.0
8118. MeCc6oAoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oA 2.00E+13 0.0 0.0
8119. MeEc8oIrA=>2c2h4+c2h5+acrol 2.00E+13 0.0 29440.0
8120. MeEc8oIrA+o2=MeEc8oIqjA 1.84E+45 -11.1 6538.0
8121. MeEc8oIqjA=CMeEc8oIqA 5.75E+08 1.0 25000.0
8122. MeEc8oIqjA=DMeEc8oIqA 9.89E+07 1.0 22000.0
8123. CMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjC 4.82E+36 -8.2 5167.0

8124. DMeEc8oIqA+o2=MeEc8oIqAqjD 4.82E+36 -8.2 5167.0
8125. MeEc8oIqAqjC=oh+MeEc8oAoIqC 5.75E+08 1.0 26000.0
8126. MeEc8oIqAqjD=oh+MeEc8oAoIqD 9.89E+07 1.0 23000.0
8127. MeEc8oAoIqC=oh+ch2hco+MeCc6oAoG 1.00E+16 0.0 43000.0
8128. MeEc8oAoIqC=oh+hcoch2hco+MeBc5oArF 1.00E+16 0.0 43000.0
8129. Fc9oA=c5h10+ch2ch2ch2hco 2.00E+13 0.0 29650.0
8130. Fc9oA=c2h5+c7e6oA 2.00E+13 0.0 28210.0
8131. Fc9oA+o2=c9oAqjF 1.84E+45 -11.1 6538.0
8132. c9oAqjF=Cc9oAqF 9.89E+07 1.0 22000.0
8133. c9oAqjF=Dc9oAqF 5.75E+08 1.0 25000.0
8134. c9oAqjF=Hc9oAqF 5.75E+08 1.0 25000.0
8135. Cc9oAqF+o2=c9oAqFqjC 1.84E+45 -11.1 6538.0
8136. Dc9oAqF+o2=c9oAqFqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
8137. Hc9oAqF+o2=c9oAqFqjH 1.84E+45 -11.1 6538.0
8138. c9oAqFqjC=oh+c9oAoFqC 4.94E+07 1.0 21000.0
8139. c9oAqFqjD=oh+c9oAoFqD 2.88E+08 1.0 23000.0
8140. c9oAqFqjH=oh+c9oAoFqH 2.88E+08 1.0 23000.0
8141. c9oAoFqC=oh+ch2hco+c7oAoD 1.00E+16 0.0 43000.0
8142. c9oAoFqC=oh+hcoch2hco+Ac6oC 1.00E+16 0.0 43000.0
8143. c9oAoFqD=oh+choch2ch2cho+Ac5oB 1.00E+16 0.0 43000.0
8144. c9oAoFqD=oh+ch2ch2hco+c6oAoC 1.00E+16 0.0 43000.0
8145. c9oAoFqH=oh+ch3hco+Ac7oBoG 1.00E+16 0.0 43000.0
8146. pche4=c2h4+P2c4h513 1.00E+15 0.0 66900.0
8147. pche5=c2h4+c7h12-13 1.00E+15 0.0 66900.0
8148. pche6=c5h10+c4h6 1.00E+15 0.0 66900.0
8149. pche1+oh=Apche2+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8150. pche2+oh=Apche2+h2o 3.12E+06 2.0 -298.0
8151. pche2+oh=Dpche2+h2o 6.00E+12 0.0 880.0
8152. pche3+oh=Dpche2+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8153. pche3+oh=Cpche4+h2o 4.50E+13 0.0 2217.0
8154. pche4+oh=Cpche4+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8155. pche4+oh=Dpche5+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8156. pche5+oh=Dpche5+h2o 6.00E+12 0.0 880.0
8157. pche5+oh=Epche6+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8158. pche6+oh=Epche6+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8159. pche6+oh=Fpche7+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
8160. pche1+ho2=Apche2+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8161. pche2+ho2=Apche2+h2o2 9.63E+03 2.6 13910.0
8162. pche2+ho2=Dpche2+h2o2 2.66E+11 0.0 11269.0
8163. pche3+ho2=Dpche2+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8164. pche3+ho2=Cpche4+h2o2 6.40E+12 0.0 14900.0
8165. pche4+ho2=Cpche4+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8166. pche4+ho2=Dpche5+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8167. pche5+ho2=Dpche5+h2o2 2.66E+11 0.0 11269.0
8168. pche5+ho2=Epche6+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8169. pche6+ho2=Epche6+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8170. pche6+ho2=Fpche7+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
8171. pche1+c2h3=Apche2+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8172. pche2+c2h3=Apche2+c2h4 6.62E-02 4.0 8068.0
8173. pche2+c2h3=Dpche2+c2h4 6.72E+10 0.0 8214.0
8174. pche3+c2h3=Dpche2+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8175. pche3+c2h3=Cpche4+c2h4 2.00E+11 0.0 8300.0
8176. pche4+c2h3=Cpche4+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8177. pche4+c2h3=Dpche5+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8178. pche5+c2h3=Dpche5+c2h4 6.72E+10 0.0 8214.0
8179. pche5+c2h3=Epche6+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8180. pche6+c2h3=Fpche7+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0
8181. pche1+ac3h5=Apche2+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8182. pche2+ac3h5=Apche2+c3h6 1.18E+11 0.0 12400.0
8183. pche2+ac3h5=Dpche2+c3h6 2.80E+12 0.0 11219.0
8184. pche3+ac3h5=Dpche2+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0

8185. pche3+ac3h5=Cpche4+c3h6 1.58E+11 0.0 12400.0
8186. pche4+ac3h5=Cpche4+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8187. pche4+ac3h5=Dpche5+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8188. pche5+ac3h5=Dpche5+c3h6 2.80E+12 0.0 11219.0
8189. pche5+ac3h5=Epche6+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8190. pche6+ac3h5=Epche6+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8191. pche6+ac3h5=Fpche7+c3h6 7.90E+10 0.0 12400.0
8192. pche1+ch3=Apche2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8193. pche2+ch3=Apche2+ch4 2.21E+00 3.5 5683.0
8194. pche2+ch3=Dpche2+ch4 1.90E+12 0.0 9010.0
8195. pche3+ch3=Dpche2+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8196. pche3+ch3=Cpche4+ch4 2.00E+11 0.0 7300.0
8197. pche4+ch3=Cpche4+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8198. pche4+ch3=Dpche5+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8199. pche5+ch3=Dpche5+ch4 1.90E+12 0.0 9010.0
8200. pche5+ch3=Epche6+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8201. pche6+ch3=Epche6+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8202. pche6+ch3=Fpche7+ch4 1.00E+11 0.0 7300.0
8203. pche1+ch3o2=Apche2+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8204. pche2+ch3o2=Apche2+ch3o2h 9.63E+03 2.6 13910.0
8205. pche2+ch3o2=Dpche2+ch3o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8206. pche3+ch3o2=Dpche2+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8207. pche3+ch3o2=Cpche4+ch3o2h 2.80E+12 0.0 14900.0
8208. pche4+ch3o2=Cpche4+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8209. pche4+ch3o2=Dpche5+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8210. pche5+ch3o2=Dpche5+ch3o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8211. pche5+ch3o2=Epche6+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8212. pche6+ch3o2=Epche6+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8213. pche6+ch3o2=Fpche7+ch3o2h 1.40E+12 0.0 14900.0
8214. pche1+h=Apche2+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8215. pche2+h=Apche2+h2 1.73E+05 2.5 2484.0
8216. pche2+h=Dpche2+h2 2.63E+14 0.0 8820.0
8217. pche3+h=Dpche2+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8218. pche3+h=Cpche4+h2 1.00E+14 0.0 3900.0
8219. pche4+h=Cpche4+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8220. pche4+h=Dpche5+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8221. pche5+h=Dpche5+h2 2.63E+14 0.0 8820.0
8222. pche5+h=Epche6+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8223. pche6+h=Epche6+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8224. pche6+h=Fpche7+h2 5.00E+13 0.0 3900.0
8225. pche1+o=Apche2+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8226. pche2+o=Apche2+oh 1.75E+11 0.7 5882.0
8227. pche2+o=Dpche2+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8228. pche3+o=Dpche2+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8229. pche3+o=Cpche4+oh 8.00E+11 0.0 -2100.0
8230. pche4+o=Cpche4+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8231. pche4+o=Dpche5+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8232. pche5+o=Dpche5+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8233. pche5+o=Epche6+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8234. pche6+o=Epche6+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8235. pche6+o=Fpche7+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8236. Apche2+o2=pche1e3+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8237. Dpche2+o2=pche1e3+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8238. Dpche2+o2=pche2e4+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8239. Cpche4+o2=pche2e4+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8240. Cpche4+o2=pche3e5+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8241. Dpche5+o2=pche3e5+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8242. Dpche5+o2=pche4e6+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8243. Epche6+o2=pche4e6+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8244. Epche6+o2=pche5e7+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8245. Fpche7+o2=pche5e7+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0

8246. Apche2=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 31230.0
8247. Dpche2=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 37620.0
8248. Cpche4=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 40410.0
8249. Cpche4=ch3+eche1e3 2.00E+13 0.0 32800.0
8250. Dpche5=c2h5+mche13 2.00E+13 0.0 31700.0
8251. Dpche5=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 38880.0
8252. Epche6=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 36210.0
8253. Epche6=chd13+nc3h7 2.00E+13 0.0 34000.0
8254. Fpche7=>2c2h4+c5h7 2.00E+13 0.0 36800.0
8255. Apche2=pche1e3+h 6.00E+12 0.0 41000.0
8256. Dpche2=pche1e3+h 1.80E+13 0.0 46000.0
8257. Dpche2=pche2e4+h 1.20E+13 0.0 43000.0
8258. Cpche4=pche2e4+h 1.20E+13 0.0 41000.0
8259. Cpche4=pche3e5+h 1.20E+13 0.0 56000.0
8260. Dpche5=pche3e5+h 1.20E+13 0.0 57000.0
8261. Dpche5=pche4e6+h 1.20E+13 0.0 45000.0
8262. Epche6=pche4e6+h 6.00E+12 0.0 43000.0
8263. Epche6=pche5e7+h 1.20E+13 0.0 46000.0
8264. Fpche7=pche5e7+h 1.20E+13 0.0 46000.0
8265. MeEc8oAoyI=pchoEojF 1.00E+08 0.9 5900.0
8266. EtDc7oAoHrI=pchoEojG 1.00E+08 0.9 5900.0
8267. ch2co+Dc7oA=EtDc7oAoHrI 1.76E+04 2.5 6130.0
8268. c5h10+ch2hco=Dc7oA 8.80E+03 2.5 6130.0
8269. c2h5+c4h7hco-1=Dc7oA 8.80E+03 2.5 6130.0
8270. EtDc7oAoCrI=pchoEojG 1.00E+08 0.9 5900.0
8271. c2h4+Dc7oAoC=EtDc7oAoCrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8272. c2h5+c5e4oAoC=Dc7oAoC 8.80E+03 2.5 6130.0
8273. c3h7chco+ch2hco=Dc7oAoC 1.76E+04 2.5 6130.0
8274. c5e4oAoC+oh=h2o+c5e4oyAoC 4.20E+12 0.0 500.0
8275. c5e4oAoC+h=h2+c5e4oyAoC 4.00E+13 0.0 4200.0
8276. c5e4oAoC+ho2=h2o2+c5e4oyAoC 1.00E+12 0.0 10000.0
8277. c5e4oyAoC=co+ch2coc2h3 2.00E+13 0.0 28700.0
8278. c5e4oyAoC+ho2=>ch2coc2h3+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8279. MeEc8oAoDrI=pchoEojH 1.00E+08 0.9 5900.0
8280. EtDc7oCoIrA=pchoEojH 1.00E+08 0.9 5900.0
8281. c2h4+c6alCco=EtDc7oCoIrA 2.11E+11 0.0 7350.0
8282. c5h10+choch2ch2co=MeEc8oAoDrI 1.00E+11 0.0 9800.0
8283. nc3h7+c6e5oAo4=MeEc8oAoDrI 1.50E+11 0.0 7200.0
8284. c6alCco=Cc6oA+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8285. c6alCco+ho2=>Cc6oA+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8286. c6e5oAo4+oh=c6e5oyAo4+h2o 2.30E+10 0.7 -1100.0
8287. c6e5oAo4+h=c6e5oyAo4+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
8288. c6e5oAo4+ho2=c6e5oyAo4+h2o2 3.00E+12 0.0 12000.0
8289. c6e5oAo4+ch3=c6e5oyAo4+ch4 7.60E+00 3.4 3740.0
8290. c6e5oAo4+o2=c6e5oyAo4+ho2 3.00E+13 0.0 39200.0
8291. c6e5oyAo4=c2h3coc2h4+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8292. c6e5oyAo4+ho2=>c2h3coc2h4+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8293. Fc9oAoE=pchoEojI 1.00E+08 0.9 5900.0
8294. MeEc8oDoIrA=pchoEojI 1.00E+08 0.9 5900.0
8295. c2h5+c7e6oAoE=Fc9oAoE 1.50E+11 0.0 7200.0
8296. c7e6oAoE+oh=c7e6oyAoE+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
8297. c7e6oAoE+h=c7e6oyAoE+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
8298. c7e6oAoE+ho2=c7e6oyAoE+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
8299. c7e6oyAoE=Fc6e1oC+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8300. c7e6oyAoE+ho2=>Fc6e1oC+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8301. c2h4+ch2coc2h3=Fc6e1oC 2.64E+04 2.5 6130.0
8302. c2h4+MeCc6oBoGrA=MeEc8oDoIrA 3.30E+11 0.0 7200.0
8303. ch2co+Bc5oA=MeCc6oBoGrA 2.11E+11 0.0 7350.0
8304. c3h6+AchxqBqD=BpchqEqG 8.80E+03 2.5 6130.0
8305. ho2+chxe1qD=AchxqBqD 8.00E+10 0.0 6000.0
8306. chxe1ojD+oh=chxe1qD 1.81E+13 0.0 0.0

8307. c4h6+ch2hco=chxe1ojD 1.32E+04 2.5 6130.0
8308. c2h4+ac3h4hco1=chxe1ojD 2.00E+11 0.0 2010.0
8309. c2h2+ch2hco=ac3h4hco1 7.77E+06 1.4 7755.0
8310. oh+c9e6oAqC=CpchqEqG 4.76E+07 1.5 34700.0
8311. oh+c9e6oAojC=c9e6oAqC 1.81E+13 0.0 0.0
8312. hcoch2hco+Ac6h11-3=c9e6oAojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8313. ch2hco+c7e4oA=c9e6oAojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8314. c7e4oA+oh=c7e4oyA+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
8315. c7e4oA+h=c7e4oyA+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
8316. c7e4oA+ho2=c7e4oyA+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
8317. c7e4oyA=Ac6h11-3+co 2.80E+13 0.0 28700.0
8318. c7e4oyA+ho2=>Ac6h11-3+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8319. oh+EtDc7e9oAqC=IpchqEqG 4.76E+07 1.5 34700.0
8320. oh+c9e5oAqC=IpchqEqG 4.76E+07 1.5 34700.0
8321. oh+EtDc7e9oAojC=EtDc7e9oAqC 1.81E+13 0.0 0.0
8322. oh+c9e5oAojC=c9e5oAqC 1.81E+13 0.0 0.0
8323. hcoch2hco+Cc6h11-1=EtDc7e9oAojC 6.66E+10 0.0 6397.0
8324. ch2hco+MeCc6e1oG=EtDc7e9oAojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8325. hcoch2hco+Cc6h11-1=c9e5oAojC 6.66E+10 0.0 6397.0
8326. ch2hco+c7e3oA=c9e5oAojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8327. MeCc6e1oG+oh=h2o+MeCc6e1oyG 4.20E+12 0.0 500.0
8328. MeCc6e1oG+h=h2+MeCc6e1oyG 4.00E+13 0.0 4200.0
8329. MeCc6e1oG+ho2=h2o2+MeCc6e1oyG 1.00E+12 0.0 10000.0
8330. MeCc6e1oyG=co+Cc6h11-1 2.00E+13 0.0 28700.0
8331. c7e3oA+oh=h2o+c7e3oyA 4.20E+12 0.0 500.0
8332. c7e3oA+h=h2+c7e3oyA 4.00E+13 0.0 4200.0
8333. c7e3oA+ho2=h2o2+c7e3oyA 1.00E+12 0.0 10000.0
8334. c7e3oyA=co+Cc6h11-1 2.00E+13 0.0 28700.0
8335. c3h6+BchxqAqD=BpchqEqH 8.80E+03 2.5 6130.0
8336. chxe1qD+ho2=BchxqAqD 8.00E+10 0.0 6000.0
8337. oh+c9e6oAqD=CpchqEqH 4.76E+07 1.5 34700.0
8338. oh+c9e6oAojD=c9e6oAqD 1.81E+13 0.0 0.0
8339. choch2ch2cho+Cc5h9-1=c9e6oAojD 5.00E+10 0.0 9600.0
8340. ch2ch2hco+c6e3oA=c9e6oAojD 3.33E+10 0.0 6397.0
8341. ho2+pche4qH=DpchqEqH 8.00E+10 0.0 6000.0
8342. oh+pche4ojH=pche4qH 1.81E+13 0.0 0.0
8343. MeEc8e9oArD=pche4ojH 1.00E+08 0.9 5900.0
8344. ch2hco+P2c4h513=MeEc8e9oArD 1.32E+04 2.5 6130.0
8345. ho2+pche5qH=FpchqEqH 8.00E+10 0.0 6000.0
8346. ho2+pche6qI=GpchqEqH 8.00E+10 0.0 6000.0
8347. oh+pche6ojI=pche6qI 1.81E+13 0.0 0.0
8348. c4h6+Bc5oA=pche6ojI 2.64E+04 2.5 6130.0
8349. ho2+pche5qI=IpchqEqH 8.00E+10 0.0 6000.0
8350. oh+pche5ojI=pche5qI 1.81E+13 0.0 0.0
8351. Fc9e4oA=pche5ojI 1.00E+08 0.9 5900.0
8352. ch2ch2hco+c6h10-13=Fc9e4oA 1.32E+04 2.5 6130.0
8353. c7e4e6oA+c2h5=Fc9e4oA 1.32E+04 2.5 6130.0
8354. c7e4e6oA+oh=h2o+c7e4e6oyA 4.20E+12 0.0 500.0
8355. c7e4e6oA+h=h2+c7e4e6oyA 4.00E+13 0.0 4200.0
8356. c7e4e6oA+ho2=h2o2+c7e4e6oyA 1.00E+12 0.0 10000.0
8357. c7e4e6oyA=co+Fc6h9-13 2.00E+13 0.0 28700.0
8358. c3h6+BchxqAqC=BpchqEqI 8.80E+03 2.5 6130.0
8359. ho2+chxe1qC=BchxqAqC 8.00E+10 0.0 6000.0
8360. oh+c9e6oAqE=CpchqEqI 4.76E+07 1.5 34700.0
8361. oh+c9e6oAojE=c9e6oAqE 1.81E+13 0.0 0.0
8362. ch2ch2ch2hco+c5e2oA=c9e6oAojE 3.33E+10 0.0 6397.0
8363. oh+MeEc8e1oIqD=GpchqEqI 4.76E+07 1.5 34700.0
8364. oh+MeEc8e1oIojD=MeEc8e1oIqD 1.81E+13 0.0 0.0
8365. ac3h5hco+Bc5oA=MeEc8e1oIojD 5.00E+10 0.0 9600.0
8366. ch2o+AechoE=pchoFojA 5.00E+10 0.0 3457.0
8367. Cchxone+c2h4=AechoE 1.32E+04 2.5 6130.0

8368. ch3hco+AmchoD=pchoFojB 3.33E+10 0.0 6397.0
8369. ethco+Cchxone=pchoFojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8370. c2h5+mchoAoD=pchoFojC 3.33E+10 0.0 6397.0
8371. mchoAoD+oh=h2o+mchoyAoD 4.20E+12 0.0 500.0
8372. mchoAoD+h=h2+mchoyAoD 4.00E+13 0.0 4200.0
8373. mchoAoD+ho2=h2o2+mchoyAoD 1.00E+12 0.0 10000.0
8374. mchoyAoD=co+Cchxone 2.00E+13 0.0 28700.0
8375. mchoyAoD+ho2=>oh+co2+Cchxone 2.00E+13 0.0 0.0
8376. nc3h7+chxoAoC=pchoFojD 2.50E+10 0.0 10090.0
8377. Ac9oDoF=pchoFojD 1.00E+08 0.9 5900.0
8378. Ac7oBoD+c2h4=Ac9oDoF 1.32E+04 2.5 6130.0
8379. ch2co+Ac5oB=Ac7oBoD 1.76E+04 2.5 6130.0
8380. chxoAoC+oh=BchxoAoC+h2o 7.80E+06 2.0 -765.0
8381. chxoAoC+h=BchxoAoC+h2 2.70E+07 2.0 5000.0
8382. chxoAoC+ho2=BchxoAoC+h2o2 1.20E+12 0.0 15500.0
8383. chxoAoC+oh=DchxoAoC+h2o 1.56E+07 2.0 -765.0
8384. chxoAoC+h=DchxoAoC+h2 5.40E+07 2.0 5000.0
8385. chxoAoC+ho2=DchxoAoC+h2o2 2.40E+12 0.0 15500.0
8386. BchxoAoC+o=c6oAoCoyF 2.00E+14 0.0 0.0
8387. BchxoAoC+ho2=oh+c6oAoCoyF 1.00E+13 0.0 0.0
8388. BchxoAoC+o2=co2+Ec5oAoB 1.23E+36 -7.2 33600.0
8389. c6oAoCoyF=co+Ec5oAoB 2.00E+13 0.0 28700.0
8390. c2h4+ch2cohco=Ec5oAoB 1.32E+04 2.5 6130.0
8391. Fc6e1oCoE=DchxoAoC 1.00E+08 0.9 5900.0
8392. ch2co+ch2coc2h3=Fc6e1oCoE 1.76E+04 2.5 6130.0
8393. MeEc8oyAoI=pchoFojE 1.00E+08 0.9 5900.0
8394. EtDc7oAoyI=pchoFojG 1.00E+08 0.9 5900.0
8395. MeEc8oAoCrI=pchoFojH 1.00E+08 0.9 5900.0
8396. EtDc7oBoIrA=pchoFojH 1.00E+08 0.9 5900.0
8397. nc3h7+c6e5oAoC=MeEc8oAoCrI 1.50E+11 0.0 7200.0
8398. c6e5oAoC+oh=c6e5oyAoC+h2o 2.30E+10 0.7 -1100.0
8399. c6e5oAoC+h=c6e5oyAoC+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
8400. c6e5oAoC+ho2=c6e5oyAoC+h2o2 3.00E+12 0.0 12000.0
8401. c6e5oAoC+ch3=c6e5oyAoC+ch4 7.60E+00 3.4 3740.0
8402. c6e5oAoC+o2=c6e5oyAoC+ho2 3.00E+13 0.0 39200.0
8403. c6e5oyAoC=Ac5e4oB+co 1.83E+15 -0.7 12910.0
8404. c6e5oyAoC+ho2=>Ac5e4oB+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8405. MeEc8oAoCrI+o2=MeEc8oAoCqjI 4.82E+36 -8.2 5167.0
8406. MeEc8oAoCqjI=DMeEc8oAoCqI 5.75E+08 1.0 22600.0
8407. MeEc8oAoCqjI=GMeEc8oAoCqI 9.89E+07 1.0 22000.0
8408. DMeEc8oAoCqI+o2=MeEc8oAoCqIqjD 1.84E+45 -11.1 6538.0
8409. MeEc8oAoCqIqjD=oh+MeEc8oAoCoIqD 5.75E+08 1.0 26000.0
8410. MeEc8oAoCoIqD=oh+hcoch2co+MeBc5oAoF 1.00E+16 0.0 43000.0
8411. GMeEc8oAoCqI+o2=MeEc8oAoCqIqjG 1.84E+45 -11.1 6538.0
8412. MeEc8oAoCqIqjG=oh+MeEc8oAoCoIqG 9.89E+07 1.0 23000.0
8413. MeEc8oAoCoIqG=oh+ch3hco+acrol+choch2ch2co 1.00E+16 0.0 43000.0
8414. MeBc5oAoF+oh=>h2o+MeBc5oyAoF 4.20E+12 0.0 500.0
8415. MeBc5oAoF+h=>h2+MeBc5oyAoF 4.00E+13 0.0 4200.0
8416. MeBc5oAoF+ho2=>h2o2+MeBc5oyAoF 1.00E+12 0.0 10000.0
8417. MeBc5oyAoF=>co+acrol+c2h5 2.00E+13 0.0 28700.0
8418. MeBc5oyAoF+ho2=>oh+co2+acrol+c2h5 2.00E+13 0.0 0.0
8419. EtDc7oBoIrA=ch2co+ac3h5hco+nc3h7 2.00E+13 0.0 30400.0
8420. EtDc7oBoIrA=ch2co+c5h10+ch2hco 2.00E+13 0.0 30400.0
8421. Fc9oAoD=pchoFojI 1.00E+08 0.9 5900.0
8422. c5h10+choch2ch2co=Fc9oAoD 1.00E+11 0.0 9800.0
8423. c2h5+c7e6oAoD=Fc9oAoD 1.50E+11 0.0 7200.0
8424. c7e6oAoD+oh=c7e6oyAoD+h2o 2.30E+10 0.7 -1100.0
8425. c7e6oAoD+h=c7e6oyAoD+h2 4.10E+09 1.2 2405.0
8426. c7e6oAoD+ho2=c7e6oyAoD+h2o2 3.00E+12 0.0 12000.0
8427. c7e6oAoD+ch3=c7e6oyAoD+ch4 7.60E+00 3.4 3740.0
8428. c7e6oAoD+o2=c7e6oyAoD+ho2 3.00E+13 0.0 39200.0

8429.	c7e6oyAoD=Ac6e5oC+co	1.83E+15	-0.7	12910.0
8430.	c7e6oyAoD+ho2=>Ac6e5oC+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
8431.	BpchqDqF=oh+c3h6+chxoAqC	5.00E+13	0.0	25500.0
8432.	c2h4+AmchqBqD=ApchqDqF	1.32E+04	2.5	6130.0
8433.	ho2+mche1qD=AmchqBqD	8.00E+10	0.0	6000.0
8434.	oh+mche1ojD=mche1qD	1.81E+13	0.0	0.0
8435.	MeEc6e5oArG=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
8436.	MeCc6e7oArF=mche1ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
8437.	ac3h4+ch2ch2ch2hco=MeEc6e5oArG	1.76E+04	2.5	6130.0
8438.	c2h4+MeCc4e3oArE=MeCc6e7oArF	8.50E+10	0.0	11300.0
8439.	ch2hco+ac3h4=MeCc4e3oArE	1.76E+04	2.5	6130.0
8440.	ho2+pche6qD=GpchqDqF	8.00E+10	0.0	6000.0
8441.	oh+pche6ojD=pche6qD	1.81E+13	0.0	0.0
8442.	chxe3oA+nc3h7=pche6ojD	2.50E+10	0.0	10090.0
8443.	Ac9e2oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
8444.	Ac9e3oF=pche6ojD	1.00E+08	0.9	5900.0
8445.	c4h6+Ac5oB=Ac9e2oF	2.64E+04	2.5	6130.0
8446.	c2h4+Ac7e1oD=Ac9e3oF	2.00E+11	0.0	2010.0
8447.	c2h2+Ac5oB=Ac7e1oD	7.77E+06	1.4	7755.0
8448.	oh+c9e1oFqD=HpchqDqF	4.76E+07	1.5	34700.0
8449.	oh+c9e1oFojD=c9e1oFqD	1.81E+13	0.0	0.0
8450.	ac3h5hco+Ac5oB=c9e1oFojD	3.33E+10	0.0	6397.0
8451.	ac3h5+c6oAoC=c9e1oFojD	5.00E+10	0.0	9600.0
8452.	mche1qDqF+c2h5=DpchqFqH	1.32E+04	2.5	6130.0
8453.	oh+MeEc8e9oAqC=DpchqFqH	4.76E+07	1.5	34700.0
8454.	oh+mche1qDojF=mche1qDqF	1.81E+13	0.0	0.0
8455.	MeEc6e5oAqCrG=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
8456.	MeCc6e7oAqErF=mche1qDojF	1.00E+08	0.9	5900.0
8457.	ac3h4+Dc4oAqC=MeEc6e5oAqCrG	1.76E+04	2.5	6130.0
8458.	ho2+ac3h5hco=Dc4oAqC	8.00E+10	0.0	6000.0
8459.	ho2+MeCc6e5e7oA=MeCc6e7oAqErF	8.00E+10	0.0	6000.0
8460.	MeCc6e5e7oA+oh=MeCc6e5e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
8461.	MeCc6e5e7oA+h=MeCc6e5e7oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
8462.	MeCc6e5e7oA+ho2=MeCc6e5e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
8463.	MeCc6e5e7oyA=co+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	28700.0
8464.	MeCc6e5e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1e4rF	2.00E+13	0.0	0.0
8465.	ac3h4+ac3h5=MeBc5e1e4rF	8.80E+03	2.5	6130.0
8466.	oh+MeEc8e9oAojC=MeEc8e9oAqC	1.81E+13	0.0	0.0
8467.	hcoch2hco+MeBc5e1rF=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
8468.	ch2hco+MeCc6e7oA=MeEc8e9oAojC	3.33E+10	0.0	6397.0
8469.	MeCc6e7oA+oh=MeCc6e7oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
8470.	MeCc6e7oA+h=MeCc6e7oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
8471.	MeCc6e7oA+ho2=MeCc6e7oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
8472.	MeCc6e7oyA=co+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	28700.0
8473.	MeCc6e7oyA+ho2=oh+co2+MeBc5e1rF	2.00E+13	0.0	0.0
8474.	Ic9e3qFqH=CpchqFqH	1.00E+08	0.9	5900.0
8475.	ho2+c9e1e6qD=Ic9e3qFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
8476.	oh+c9e1e6ojD=c9e1e6qD	1.81E+13	0.0	0.0
8477.	ac3h5+c6e3oA=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
8478.	ac3h5hco+Cc5h9-1=c9e1e6ojD	8.80E+03	2.5	6130.0
8479.	c6e3oA+oh=c6e3oyA+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
8480.	c6e3oA+h=c6e3oyA+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
8481.	c6e3oA+ho2=c6e3oyA+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
8482.	c6e3oyA=co+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	28700.0
8483.	c6e3oyA+ho2=oh+co2+Cc5h9-1	2.00E+13	0.0	0.0
8484.	ho2+pche5qH=EpchqFqH	8.00E+10	0.0	6000.0
8485.	oh+pche5ojH=pche5qH	1.81E+13	0.0	0.0
8486.	EtDc7e1oIrC=pche5ojH	1.00E+08	0.9	5900.0
8487.	c7h12-13+ch2hco=EtDc7e1oIrC	1.32E+04	2.5	6130.0
8488.	chxoAoD+nc3h7=pchoGojD	8.50E+10	0.0	11900.0
8489.	Ac9oCoF=pchoGojD	1.00E+08	0.9	5900.0
8490.	c7oyAoD+c2h4=Ac9oCoF	2.11E+11	0.0	7350.0
8491.	c7oAoD+oh=>h2o+c7oyAoD	4.20E+12	0.0	500.0
8492.	c7oAoD+h=>h2+c7oyAoD	4.00E+13	0.0	4200.0
8493.	c7oAoD+ho2=>h2o2+c7oyAoD	1.00E+12	0.0	10000.0
8494.	c7oyAoD=>co+Ac6oC	2.00E+13	0.0	28700.0
8495.	c7oyAoD+ho2=>oh+co2+Ac6oC	2.00E+13	0.0	0.0
8496.	Fc9oAoC=pchoGojE	1.00E+08	0.9	5900.0
8497.	c5h10+ch2coch2hco=Fc9oAoC	1.50E+11	0.0	7200.0
8498.	Fc9oAoC+o2=c9oAoCqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
8499.	c9oAoCqjF=Dc9oAoCqF	5.75E+08	1.0	22500.0
8500.	Dc9oAoCqF+o2=c9oAoCqFqjD	1.84E+45	-11.1	6538.0
8501.	c9oAoCqFqjD=oh+c9oAoCoFqD	2.88E+08	1.0	23000.0
8502.	c9oAoCoFqD=oh+hcoch2co+c6oAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
8503.	c6oAoC+oh=>h2o+c6oyAoC	4.20E+12	0.0	500.0
8504.	c6oAoC+h=>h2+c6oyAoC	4.00E+13	0.0	4200.0
8505.	c6oAoC+ho2=>h2o2+c6oyAoC	1.00E+12	0.0	10000.0
8506.	c6oyAoC=>co+Ac5oB	2.00E+13	0.0	28700.0
8507.	c6oyAoC+ho2=>oh+co2+Ac5oB	2.00E+13	0.0	0.0
8508.	c2h5+acrol=Bc5oA	1.50E+11	0.0	7200.0
8509.	EtDc7oyAoI=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
8510.	Ipc9oAoB=pchoGojF	1.00E+08	0.9	5900.0
8511.	c5h10+c2h4cohco=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
8512.	c2h4+choco=c2h4cohco	2.11E+11	0.0	7350.0
8513.	nc3h7+c6e5oAoB=Ipc9oAoB	1.50E+11	0.0	7200.0
8514.	pche4e6+oh=h2o+Ipche4e6	2.25E+13	0.0	2217.0
8515.	pche4e6+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
8516.	pche5e7+oh=h2o+Ipche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
8517.	pche5e7+oh=h2o+Dpche5e7	2.25E+13	0.0	2217.0
8518.	pche4e6+h=h2+Ipche4e6	5.00E+13	0.0	3900.0
8519.	pche4e6+h=h2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
8520.	pche5e7+h=h2+Ipche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
8521.	pche5e7+h=h2+Dpche5e7	5.00E+13	0.0	3900.0
8522.	pche4e6+ho2=h2o2+Ipche4e6	3.20E+12	0.0	14900.0
8523.	pche4e6+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
8524.	pche5e7+ho2=h2o2+Ipche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
8525.	pche5e7+ho2=h2o2+Dpche5e7	3.20E+12	0.0	14900.0
8526.	pche4e6+o2=ho2+Ipche4e6	4.00E+12	0.0	40000.0
8527.	pche4e6+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
8528.	pche5e7+o2=ho2+Ipche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
8529.	pche5e7+o2=ho2+Dpche5e7	4.00E+12	0.0	40000.0
8530.	pche4e6+ch3=ch4+Ipche4e6	1.00E+11	0.0	7300.0
8531.	pche4e6+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
8532.	pche5e7+ch3=ch4+Ipche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
8533.	pche5e7+ch3=ch4+Dpche5e7	1.00E+11	0.0	7300.0
8534.	Ipche4e6=pbz+h	1.20E+13	0.0	22800.0
8535.	Dpche5e7=pbz+h	1.20E+13	0.0	20000.0
8536.	Ipche5e7=pbz+h	6.00E+12	0.0	20000.0
8537.	Ipche5e7=c6h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	8800.0
8538.	Ipche4e6+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
8539.	Dpche5e7+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
8540.	Ipche5e7+h=pbz+h2	3.16E+13	0.0	0.0
8541.	Ipche4e6+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
8542.	Dpche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
8543.	Ipche5e7+o2=pbz+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
8544.	Ipche4e6+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
8545.	Dpche5e7+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
8546.	Ipche5e7+o=pbz+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
8547.	Ipche4e6+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
8548.	Dpche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
8549.	Ipche5e7+oh=pbz+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
8550.	Ipche4e6+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
8551.	Dpche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
8552.	Ipche5e7+ho2=pbz+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
8553.	Ipche4e6+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
8554.	Dpche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
8555.	Ipche5e7+ch3=pbz+ch4	8.00E+12	0.0	0.0
8556.	Ipche4e6+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
8557.	Dpche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
8558.	Ipche5e7+c2h5=pbz+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
8559.	Ipche4e6+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
8560.	Dpche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
8561.	Ipche5e7+c2h3=pbz+c2h4	3.98E+12	0.0	0.0
8562.	Ipche4e6+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
8563.	Dpche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
8564.	Ipche5e7+ac3h5=pbz+c3h6	3.98E+12	0.0	0.0
8565.	Ipche4e6+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
8566.	Dpche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
8567.	Ipche5e7+ch3o2=pbz+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
8568.	ac3h5+ch3co=c5e4oB	1.00E+13	0.0	0.0
8569.	c5e4oB+o2=Cc5e4oB+ho2	7.00E+10	0.0	36015.0
8570.	c5e4oB+oh=Cc5e4oB+h2o	7.70E+05	2.2	622.0
8571.	c5e4oB+h=Cc5e4oB+h2	7.00E+06	2.0	0.0
8572.	c5e4oB+ho2=Cc5e4oB+h2o2	2.00E+11	0.0	12600.0
8573.	c5e4oB+ch3=Cc5e4oB+ch4	2.00E+14	0.0	22800.0
8574.	Cc5e4oB+o=ch3cocho+c2h3	2.00E+14	0.0	0.0
8575.	Cc5e4oB+o=ch3co+acrol	2.00E+14	0.0	0.0
8576.	Cc5e4oB+ho2=ch3cocho+c2h3+oh	1.00E+13	0.0	0.0
8577.	Cc5e4oB+ho2=ch3co+acrol+oh	1.00E+13	0.0	0.0
8578.	c5e4oB+o2=Ac5e4oB+ho2	3.02E+13	0.0	48500.0
8579.	c5e4oB+oh=Ac5e4oB+h2o	3.38E+07	1.7	830.0
8580.	c5e4oB+h=Ac5e4oB+h2	1.15E+05	2.7	6260.0
8581.	c5e4oB+ho2=Ac5e4oB+h2o2	8.50E+12	0.0	20460.0
8582.	c5e4oB+ch3=Ac5e4oB+ch4	1.98E+11	0.0	9784.0
8583.	c7e6oyA+ho2=>co2+oh+Fc6h11-1	2.00E+13	0.0	0.0
8584.	Fc9oAoG+o2=c9oAoGqjF	1.84E+45	-11.1	6538.0
8585.	c9oAoGqjF=Hc9oAoGqF	5.75E+08	1.0	22600.0
8586.	Hc9oAoGqF+o2=c9oAoGqFqjH	1.84E+45	-11.1	6538.0
8587.	c9oAoGqFqjH=oh+c9oAoGoFqH	2.88E+08	1.0	20600.0
8588.	c9oAoGoFqH=>oh+ch3hco+c7oyAoBoG	1.00E+16	0.0	43000.0
8589.	c7oyAoBoG=>co+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	28700.0
8590.	c7oyAoBoG+ho2=>co2+oh+c6oyAoF	2.00E+13	0.0	0.0
8591.	c6oyAoF=>co+Ec5oA	2.00E+13	0.0	28700.0
8592.	c6oyAoF+ho2=>co2+oh+Ec5oA	2.00E+13	0.0	0.0
8593.	c2h4+ch2ch2hco=Ec5oA	3.30E+11	0.0	7200.0
8594.	Ec5oA+o2=c5oAqjE	4.82E+36	-8.2	5167.0
8595.	c5oAqjE=Cc5oAqE	5.75E+08	1.0	25000.0
8596.	c5oAqjE=Bc5oAqE	9.89E+07	1.0	20000.0
8597.	Cc5oAqE=>oh+ch2o+ac3h5hco	2.00E+13	0.0	28700.0
8598.	Cc5oAqE+o2=c5oAqEqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
8599.	Bc5oAqE+o2=c5oAqEqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
8600.	c5oAqEqjC=oh+c5oAoEqC	2.88E+08	1.0	23000.0
8601.	c5oAqEqjB=oh+c5oAoEqB	4.94E+07	1.0	18000.0
8602.	c5oAoEqC=>oh+hcoch2hco+ch2hco	1.00E+16	0.0	43000.0
8603.	c5oAoEqB=>oh+hco+choch2ch2cho	1.00E+16	0.0	43000.0
8604.	ch2co+cyc6h11=AechoB	2.11E+11	0.0	7350.0
8605.	Bc5oAoC+o=c2h5co+chocho	2.00E+14	0.0	0.0
8606.	Bc5oAoC+ho2=oh+c2h5co+chocho	1.00E+13	0.0	0.0
8607.	Bc5oAoC+o2=c2h5+co2+chocho	1.23E+36	-7.2	33600.0
8608.	c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oyAoCoF	4.20E+12	0.0	500.0
8609.	c6oAoCoF+h=>h2+c6oyAoCoF	4.00E+13	0.0	4200.0
8610.	c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oyAoCoF	1.00E+12	0.0	10000.0
8611.	c6oyAoCoF=>co+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
8612.	c6oyAoCoF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
8613.	c6oAoCoF+oh=>h2o+c6oAoCoyF	4.20E+12	0.0	500.0
8614.	c6oAoCoF+h=>h2+c6oAoCoyF	4.00E+13	0.0	4200.0
8615.	c6oAoCoF+ho2=>h2o2+c6oAoCoyF	1.00E+12	0.0	10000.0
8616.	c6oAoCoyF=>co+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	28700.0
8617.	c6oAoCoyF+ho2=>oh+co2+Ec5oAoC	2.00E+13	0.0	0.0
8618.	c2h4+hcoch2co=Ec5oAoC	2.11E+11	0.0	7350.0
8619.	Cc6oAoD=etvinket+hco	2.00E+13	0.0	33800.0
8620.	MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oyAoDoG	4.20E+12	0.0	500.0
8621.	MeCc6oAoDoG+h=>h2+MeCc6oyAoDoG	4.00E+13	0.0	4200.0
8622.	MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oyAoDoG	1.00E+12	0.0	10000.0
8623.	MeCc6oyAoDoG=>co+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	28700.0
8624.	MeCc6oyAoDoG+ho2=>oh+co2+MeBc5oAoCrF	2.00E+13	0.0	0.0
8625.	MeCc6oAoDoG+oh=>h2o+MeCc6oAoDoyG	4.20E+12	0.0	500.0
8626.	MeCc6oAoDoG+h=>h2+MeCc6oAoDoyG	4.00E+13	0.0	4200.0
8627.	MeCc6oAoDoG+ho2=>h2o2+MeCc6oAoDoyG	1.00E+12	0.0	10000.0
8628.	MeCc6oAoDoyG=>co+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	28700.0
8629.	MeCc6oAoDoyG+ho2=>oh+co2+Cc6oAoD	2.00E+13	0.0	0.0
8630.	acrol+c2h5co=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
8631.	hco+etvinket=MeBc5oAoCrF	2.11E+11	0.0	7350.0
8632.	c7e6oAoC+oh=c7e6oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
8633.	c7e6oAoC+h=c7e6oyAoC+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
8634.	c7e6oAoC+ho2=c7e6oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
8635.	c7e6oyAoC=Ac6e5oB+co	2.00E+13	0.0	28700.0
8636.	c7e6oyAoC+ho2=>Ac6e5oB+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
8637.	Ac9oDoF+o2=c9oDoFqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
8638.	c9oDoFqjA=Cc9oDoFqA	5.75E+08	1.0	22600.0
8639.	Cc9oDoFqA+o2=c9oDoFqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
8640.	c9oDoFqAqjC=oh+c9oAoDoFqC	5.75E+08	1.0	26000.0
8641.	c9oAoDoFqC=oh+hcoch2hco+c6oyAoC	1.00E+16	0.0	43000.0
8642.	ho2+pche5qD=FpchqDqE	8.00E+10	0.0	6000.0
8643.	pche5qD=pche5ojD+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
8644.	oh+c9e1qAoF=FpchqDqE	4.76E+07	1.5	34700.0
8645.	c9e1qAoF=c9e1ojAoF+oh	1.00E+16	0.0	43000.0
8646.	Ac6oC+acrol=c9e1ojAoF	1.32E+04	2.5	6130.0
8647.	c5e4oB+oh=Dc5oBohE	9.93E+11	0.0	-960.0
8648.	Dc5oBohE+o2=c5oBqjDohE	1.20E+11	0.0	-1100.0
8649.	c5oBqjDohE=c4oAoC+ch2o+oh	1.25E+10	0.0	18900.0
8650.	c4oAoC+oh=c4oyAoC+h2o	4.20E+12	0.0	500.0
8651.	c4oAoC+h=c4oyAoC+h2	4.00E+13	0.0	4200.0
8652.	c4oAoC+ho2=c4oyAoC+h2o2	1.00E+12	0.0	10000.0
8653.	c4oyAoC=ch2coch3+co	2.00E+13	0.0	28700.0
8654.	c4oyAoC+ho2=>ch2coch3+co2+oh	2.00E+13	0.0	0.0
8655.	ch2co+mchA=ApchoB	1.76E+04	2.5	6130.0
8656.	acrol+cyc6h11=BpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
8657.	c2h4+chxco=ApchoC	1.00E+11	0.0	7800.0
8658.	hco+eche1=CpchoA	1.00E+11	0.0	7800.0
8659.	c4h6+hco=Cc5e4oA	1.00E+11	0.0	7800.0
8660.	mche1+ch2hco=DpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
8661.	c2h4+AmchoC=ApchoE	1.32E+04	2.5	6130.0
8662.	cyc6h10+ch2ch2hco=EpchoA	1.32E+04	2.5	6130.0
8663.	c2h4+AmchoD=ApchoF	1.32E+04	2.5	6130.0
8664.	EtDc7e6oArI=FpchoA	1.00E+08	0.9	5900.0
8665.	ch2hco+c7h12-16=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
8666.	c4h7hco-1+Dc4h7-1=Dc9e8oA	1.32E+04	2.5	6130.0
8667.	c2h4+Dc7e6oA=EtDc7e6oArI	1.32E+04	2.5	6130.0
8668.	c5h8-14+ch2hco=Dc7e6oA	1.32E+04	2.5	6130.0
8669.	ch3chco+cyc6h11=BpchoC	1.76E+04	2.5	6130.0
8670.	Ic9e3oB=CpchoB	1.00E+08	0.9	5900.0
8671.	c2h4+Gc7e3oB=Ic9e3oB	1.32E+04	2.5	6130.0
8672.	c2h4+Cc5e4oB=Gc7e3oB	8.80E+03	2.5	6130.0

8673. ch3co+mche1=DpchoB 1.00E+11 0.0 7800.0
8674. c3h6+Bchxone=BpchoE 8.80E+03 2.5 6130.0
8675. ch2coch3+cyc6h10=EpchoB 8.80E+03 2.5 6130.0
8676. c2h4+Ec5e4oB=Gc7e4oB 2.00E+11 0.0 2010.0
8677. c3h6+Cchxone=BpchoF 2.64E+04 2.5 6130.0
8678. Dc9e8oB=FpchoB 1.00E+08 0.9 5900.0
8679. EtDc7e6oBrI=FpchoB 1.00E+08 0.9 5900.0
8680. ch3co+c7h12-16=Dc9e8oB 2.00E+11 0.0 7800.0
8681. c5e4oB+Dc4h7-1=Dc9e8oB 1.32E+04 2.5 6130.0
8682. c2h4+Dc7e6oB=EtDc7e6oBrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8683. c5h8-14+ch3co=Dc7e6oB 1.00E+11 0.0 7800.0
8684. c5e4oB+c2h3=Dc7e6oB 2.00E+11 0.0 2010.0
8685. c3h6+Dchxone=BpchoG 2.64E+04 2.5 6130.0
8686. MeDc8e7oBrI=GpchoB 1.00E+08 0.9 5900.0
8687. c5e4oB+Dc4h7-1=MeDc8e7oBrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8688. ch2coch3+c6h10-15=MeDc8e7oBrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8689. MeDc8e9oCrH=DpchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
8690. c2h4+MeCc6e7oDrA=MeDc8e9oCrH 1.32E+04 2.5 6130.0
8691. c2h4+Bc5e1oC=MeCc6e7oDrA 2.00E+11 0.0 2010.0
8692. c2h5+ch2cco=Bc5e1oC 1.76E+04 2.5 6130.0
8693. c9e6oyA=CpchoE 1.00E+08 0.9 5900.0
8694. c9e6oyA=co+Hc8h15-3 2.00E+13 0.0 28700.0
8695. c2h4+Ac6h11-3=Hc8h15-3 1.32E+04 2.5 6130.0
8696. cyc6h10+c2h5co=EpchoC 1.00E+11 0.0 7800.0
8697. ch3+eche1oE=CpchoF 1.32E+04 2.5 6130.0
8698. Ac9e6oD=CpchoF 1.00E+08 0.9 5900.0
8699. c2h4+Ac7e4oB=Ac9e6oD 8.80E+03 2.5 6130.0
8700. ch2co+Cc5h9-1=Ac7e4oB 8.80E+03 2.5 6130.0
8701. EtDc7e6oCrI=FpchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
8702. Dc9e8oC=FpchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
8703. Dc7e1oE+c2h4=EtDc7e6oCrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8704. etvinket+c2h3=Dc7e1oE 4.00E+11 0.0 2010.0
8705. etvinket+Dc4h7-1=Dc9e8oC 1.32E+04 2.5 6130.0
8706. ch3+eche1oF=CpchoG 1.32E+04 2.5 6130.0
8707. MeDc8e7oCrI=GpchoC 1.00E+08 0.9 5900.0
8708. etvinket+Dc4h7-1=MeDc8e7oCrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8709. c6h10-15+c2h5co=MeDc8e7oCrI 1.00E+11 0.0 7800.0
8710. mche1oC+c2h5=DpchoE 1.32E+04 2.5 6130.0
8711. MeEc8e9oyA=DpchoF 1.00E+08 0.9 5900.0
8712. ac3h4+nc3h7=MeBc5e1rF 2.00E+11 0.0 11300.0
8713. MeBc5e1rF+o2=ch2o+Ac5oB 3.08E+09 0.4 16910.0
8714. MeEc8e9oyA=co+MeDc7e8rA 2.00E+13 0.0 28700.0
8715. MeEc8e9oyA+ho2=co2+oh+MeDc7e8rA 2.00E+13 0.0 0.0
8716. c2h4+MeBc5e1rF=MeDc7e8rA 8.80E+03 2.5 6130.0
8717. mche1oE+c2h5=DpchoG 1.32E+04 2.5 6130.0
8718. chxe2oA+nc3h7=EpchoF 1.32E+04 2.5 6130.0
8719. EtDc7e1oCrI=FpchoE 1.00E+08 0.9 5900.0
8720. c2h4+Dc7e1oC=EtDc7e1oCrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8721. divinket+c2h5=Dc7e1oC 2.64E+04 2.5 6130.0
8722. chxe3oA+nc3h7=EpchoG 1.32E+04 2.5 6130.0
8723. MeEc8e1oyI=GpchoE 1.00E+08 0.9 5900.0
8724. MeEc8e1oyI=co+Ec8h15-1 2.00E+13 0.0 28700.0
8725. ac3h5+c5h10=Ec8h15-1 8.80E+03 2.5 6130.0
8726. c2h5+c6h10-15=Ec8h15-1 1.32E+04 2.5 6130.0
8727. chxe3oA+nc3h7=EpchoH 1.32E+04 2.5 6130.0
8728. EtDc7e1oHrI=HpchoE 1.00E+08 0.9 5900.0
8729. Fc9e1oE=HpchoE 1.00E+08 0.9 5900.0
8730. c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oE 1.32E+04 2.5 6130.0
8731. c3h7chco+Dc4h7-1=Fc9e1oE 1.76E+04 2.5 6130.0
8732. ch2co+Dc7h13-1=EtDc7e1oHrI 1.76E+04 2.5 6130.0
8733. c2h5+c5h8-14=Dc7h13-1 5.28E+04 2.5 6130.0

8734. chxe2oA+nc3h7=IpchoE 1.32E+04 2.5 6130.0
8735. Fc9e1oC=FpchoG 1.00E+08 0.9 5900.0
8736. ch2coc2h3+c5h10=Fc9e1oC 8.80E+03 2.5 6130.0
8737. c7e1e6oC+c2h5=Fc9e1oC 1.32E+04 2.5 6130.0
8738. MeEc8e1oCrI=GpchoF 1.00E+08 0.9 5900.0
8739. ch2coc2h3+c5h10=MeEc8e1oCrI 8.80E+03 2.5 6130.0
8740. c6e1e5oC+nc3h7=MeEc8e1oCrI 1.32E+04 2.5 6130.0
8741. EtDc7e1oyI=HpchoF 1.00E+08 0.9 5900.0
8742. EtDc7e1oyI=co+MeDc7e1rH 2.00E+13 0.0 28700.0
8743. nc3h7+c5h8-14=MeDc7e1rH 2.64E+04 2.5 6130.0
8744. ac3h5+c5h10=MeDc7e1rH 8.80E+03 2.5 6130.0
8745. ho2+pche3qF=CpchqDqF 8.00E+10 0.0 6000.0
8746. Etall+ch2ch2ch2hco=MeEc8e5oArI 1.76E+04 2.5 6130.0
8747. ch3co+Etall=MeCc6e3oArG 1.76E+04 2.5 6130.0
8748. Etall+ho2=oh+ch2o+c4h6 5.00E+11 0.0 19000.0
8749. Etall+ho2=oh+ch2co+c3h6 5.00E+11 0.0 19000.0
8750. Etall+ho2=oh+ethco+c2h2 5.00E+11 0.0 19000.0
8751. ho2+pche4qB=EpchqDqB 8.00E+10 0.0 6000.0
8752. c6e2e5oA+oh=c6e2e5oyA+h2o 4.20E+12 0.0 500.0
8753. c6e2e5oA+h=c6e2e5oyA+h2 4.00E+13 0.0 4200.0
8754. c6e2e5oA+ho2=c6e2e5oyA+h2o2 1.00E+12 0.0 10000.0
8755. c6e2e5oyA=c2h2+ac3h5+co 2.00E+13 0.0 28700.0
8756. c6e2e5oyA+ho2=>c2h2+ac3h5+co2+oh 2.00E+13 0.0 0.0
8757. mche1oE+oh=ch2o+Dchxone 1.40E+12 0.0 -900.0
8758. mche1oE+oh=ch3+chxoAoD 1.40E+12 0.0 -900.0
8759. eche1e3+oh=ch2o+Cmche1 1.40E+12 0.0 -900.0
8760. eche1e3+oh=ch3+mche2oA 1.40E+12 0.0 -900.0
8761. eche1e3+oh=2c2h4+ch2coc2h3 1.40E+12 0.0 -900.0
8762. eche1e3+oh=c4h6+ch2ch2ch2hco 1.40E+12 0.0 -900.0
8763. phc4h9=pc4h9+c6h5 5.00E+16 0.0 86500.0
8764. phc4h9=phch2+nc3h7 4.00E+15 0.0 76260.0
8765. phc4h9=Aphc2h4+c2h5 5.00E+16 0.0 78500.0
8766. phc4h9=pbzjA+ch3 5.00E+16 0.0 86755.0
8767. phc4h9=Aphc4h8+h 9.00E+15 0.0 101120.0
8768. phc4h9=Bphc4h8+h 6.00E+15 0.0 98460.0
8769. phc4h9=Cphc4h8+h 6.00E+15 0.0 98460.0
8770. phc4h9=Dphc4h8+h 6.00E+15 0.0 86515.0
8771. phc4h9+o2=Dphc4h8+ho2 1.20E+12 0.0 38344.0
8772. phc4h9+o2=Cphc4h8+ho2 4.00E+13 0.0 47600.0
8773. phc4h9+o2=Bphc4h8+ho2 4.00E+13 0.0 47600.0
8774. phc4h9+o2=Aphc4h8+ho2 2.50E+13 0.0 49000.0
8775. phc4h9+h=c6h6+pc4h9 4.80E+13 0.0 5123.0
8776. phc4h9+oh=c6h5oh+pc4h9 7.83E+02 2.9 3221.0
8777. phc4h9+oh=Dphc4h8+h2o 2.65E+12 0.0 0.0
8778. phc4h9+oh=Bphc4h8+h2o 7.08E+06 1.9 -159.0
8779. phc4h9+oh=Cphc4h8+h2o 7.08E+06 1.9 -159.0
8780. phc4h9+oh=Aphc4h8+h2o 3.16E+07 1.8 934.0
8781. phc4h9+ho2=Aphc4h8+h2o2 1.80E+04 2.5 16790.0
8782. phc4h9+ho2=Bphc4h8+h2o2 4.90E+04 2.5 14860.0
8783. phc4h9+ho2=Cphc4h8+h2o2 4.90E+04 2.5 14860.0
8784. phc4h9+ho2=Dphc4h8+h2o2 6.80E+03 2.5 10115.0
8785. phc4h9+h=Aphc4h8+h2 1.33E+06 2.5 6756.0
8786. phc4h9+h=Bphc4h8+h2 1.30E+06 2.4 4470.0
8787. phc4h9+h=Cphc4h8+h2 1.30E+06 2.4 4470.0
8788. phc4h9+h=Dphc4h8+h2 1.01E+04 2.9 1931.0
8789. phc4h9+o=Dphc4h8+oh 4.00E+11 0.0 -2100.0
8790. phc4h9+o=Cphc4h8+oh 5.62E+13 0.0 5200.0
8791. phc4h9+o=Bphc4h8+oh 5.62E+13 0.0 5200.0
8792. phc4h9+o=Aphc4h8+oh 1.13E+14 0.0 7850.0
8793. phc4h9+ch3=Aphc4h8+ch4 2.75E-01 3.6 7150.0
8794. phc4h9+ch3=Bphc4h8+ch4 1.50E+00 3.5 5480.0

8795. phc4h9+ch3=Cphc4h8+ch4 1.50E+00 3.5 5480.0
8796. phc4h9+ch3=Dphc4h8+ch4 1.50E+00 3.5 4480.0
8797. phc4h9+c2h5=Dphc4h8+c2h6 6.72E+10 0.0 7214.0
8798. phc4h9+c2h5=Cphc4h8+c2h6 1.00E+11 0.0 10400.0
8799. phc4h9+c2h5=Bphc4h8+c2h6 1.00E+11 0.0 10400.0
8800. phc4h9+c2h5=Aphc4h8+c2h6 1.58E+11 0.0 12300.0
8801. phc4h9+c2h3=Dphc4h8+c2h4 2.60E+12 0.0 6012.0
8802. phc4h9+c2h3=Cphc4h8+c2h4 8.00E+11 0.0 16800.0
8803. phc4h9+c2h3=Bphc4h8+c2h4 8.00E+11 0.0 16800.0
8804. phc4h9+c2h3=Aphc4h8+c2h4 1.00E+12 0.0 18000.0
8805. phc4h9+nc3h7=Dphc4h8+c3h8 6.72E+10 0.0 7214.0
8806. phc4h9+nc3h7=Cphc4h8+c3h8 1.00E+11 0.0 10400.0
8807. phc4h9+nc3h7=Bphc4h8+c3h8 1.00E+11 0.0 10400.0
8808. phc4h9+nc3h7=Aphc4h8+c3h8 1.58E+11 0.0 12300.0
8809. phc4h9+ic3h7=Dphc4h8+c3h8 6.72E+10 0.0 8214.0
8810. phc4h9+ic3h7=Cphc4h8+c3h8 1.00E+11 0.0 11400.0
8811. phc4h9+ic3h7=Bphc4h8+c3h8 1.00E+11 0.0 11400.0
8812. phc4h9+ic3h7=Aphc4h8+c3h8 1.58E+11 0.0 13300.0
8813. phc4h9+ac3h5=Dphc4h8+c3h6 2.80E+12 0.0 11219.0
8814. phc4h9+ac3h5=Cphc4h8+c3h6 3.16E+11 0.0 16400.0
8815. phc4h9+ac3h5=Bphc4h8+c3h6 3.16E+11 0.0 16400.0
8816. phc4h9+ac3h5=Aphc4h8+c3h6 7.94E+11 0.0 20500.0
8817. phc4h9+ch3o=Cphc4h8+ch3oh 6.00E+11 0.0 7000.0
8818. phc4h9+ch3o=Bphc4h8+ch3oh 6.00E+11 0.0 7000.0
8819. phc4h9+ch3o=Aphc4h8+ch3oh 3.00E+11 0.0 7000.0
8820. phc4h9+c2h5o=Cphc4h8+c2h5oh 6.00E+11 0.0 7000.0
8821. phc4h9+c2h5o=Bphc4h8+c2h5oh 6.00E+11 0.0 7000.0
8822. phc4h9+c2h5o=Aphc4h8+c2h5oh 3.00E+11 0.0 7000.0
8823. phc4h9+ch3o2=Dphc4h8+ch3o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8824. phc4h9+ch3o2=Cphc4h8+ch3o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8825. phc4h9+ch3o2=Bphc4h8+ch3o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8826. phc4h9+ch3o2=Aphc4h8+ch3o2h 1.70E+13 0.0 20460.0
8827. phc4h9+c2h5o2=Dphc4h8+c2h5o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8828. phc4h9+c2h5o2=Cphc4h8+c2h5o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8829. phc4h9+c2h5o2=Bphc4h8+c2h5o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8830. phc4h9+c2h5o2=Aphc4h8+c2h5o2h 1.70E+13 0.0 20460.0
8831. phc4h9+nc3h7o2=Dphc4h8+nc3h7o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8832. phc4h9+nc3h7o2=Cphc4h8+nc3h7o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8833. phc4h9+nc3h7o2=Bphc4h8+nc3h7o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8834. phc4h9+nc3h7o2=Aphc4h8+nc3h7o2h 1.70E+13 0.0 20460.0
8835. phc4h9+ic3h7o2=Dphc4h8+ic3h7o2h 2.66E+11 0.0 11269.0
8836. phc4h9+ic3h7o2=Cphc4h8+ic3h7o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8837. phc4h9+ic3h7o2=Bphc4h8+ic3h7o2h 1.12E+13 0.0 17700.0
8838. phc4h9+ic3h7o2=Aphc4h8+ic3h7o2h 1.70E+13 0.0 20460.0
8839. Dphc4h8=styren+c2h5 2.00E+13 0.0 31800.0
8840. c3h6+phch2=Bphc4h8 8.50E+10 0.0 11300.0
8841. Cphc4h8=ch3+phc3h5-1 2.00E+13 0.0 24000.0
8842. Cphc4h8=c6h5+c4h8 2.00E+13 0.0 35900.0
8843. Aphc2h4+c2h4=Aphc4h8 2.41E+49 -11.2 28800.0
8844. Dphsecb=styren+c2h5 2.00E+13 0.0 18600.0
8845. Dphc4h8=phc4h7-3+h 1.20E+13 0.0 47900.0
8846. Cphc4h8=phc4h7-3+h 1.20E+13 0.0 36000.0
8847. Cphc4h8=phc4h7-2+h 1.20E+13 0.0 33400.0
8848. Bphc4h8=phc4h7-2+h 1.20E+13 0.0 33400.0
8849. Bphc4h8=phc4h7-1+h 1.80E+13 0.0 31300.0
8850. Aphc4h8=phc4h7-1+h 1.20E+13 0.0 28600.0
8851. Dphc4h8+o2=phc4h7-3+ho2 1.58E+12 0.0 15200.0
8852. Cphc4h8+o2=phc4h7-3+ho2 1.00E+12 0.0 5000.0
8853. Cphc4h8+o2=phc4h7-2+ho2 1.00E+15 0.0 11000.0
8854. Bphc4h8+o2=phc4h7-2+ho2 1.00E+15 0.0 11000.0
8855. Bphc4h8+o2=phc4h7-1+ho2 1.00E+15 0.0 11000.0

8856. Aphc4h8+o2=phc4h7-1+ho2 1.00E+15 0.0 11000.0
8857. Dphc4h8+o=phhco+nc3h7 1.60E+13 0.0 0.0
8858. Cphc4h8+o=phch2+ethco 2.00E+13 0.0 4000.0
8859. Bphc4h8+o=Aphc2h4+ch3hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8860. Aphc4h8+o=ch2o+pbzjA 2.00E+13 0.0 4000.0
8861. Dphc4h8+oh=phhco+c3h8 1.60E+13 0.0 0.0
8862. Cphc4h8+oh=toluen+ethco 2.00E+13 0.0 4000.0
8863. Bphc4h8+oh=phc2h5+ch3hco 2.00E+13 0.0 4000.0
8864. Aphc4h8+oh=pbz+ch2o 2.00E+13 0.0 4000.0
8865. Dphc4h8+ho2=>phhco+nc3h7+oh 1.60E+13 0.0 0.0
8866. Cphc4h8+ho2=>phch2+ethco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8867. Bphc4h8+ho2=>Aphc2h4+ch3hco+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8868. Aphc4h8+ho2=>ch2o+pbzjA+oh 5.00E+12 0.0 0.0
8869. Cphc4h8=Dphsecb 2.00E+11 0.0 20000.0
8870. Aphc4h8=Dphc4h8 6.00E+11 0.0 14000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 3.00E+12 0.0 34000.0
8871. Aphc4h8=Cphc4h8 4.50E+12 0.0 35000.0
8872. Cphc4h8=Bphc4h8 1.20E+13 0.0 36000.0
Reverse Arrhenius coefficients: 1.20E+13 0.0 36000.0
8873. Cphc4h8=Dphc4h8 1.20E+13 0.0 35000.0
8874. Cphc4h8+o2=phc4h8qjC 1.84E+45 -11.1 6538.0
8875. Bphc4h8+o2=phc4h8qjB 1.84E+45 -11.1 6538.0
8876. Aphc4h8+o2=phc4h8qjA 4.82E+36 -8.2 5167.0
8877. Dphc4h8+o2=phc4h8qjD 2.43E+39 -9.0 8620.0
8878. Dphc4h8+ho2=phc4h8ojD+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
8879. Cphc4h8+ho2=phc4h8ojC+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
8880. Bphc4h8+ho2=phc4h8ojB+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
8881. Aphc4h8+ho2=phc4h8ojA+oh 1.90E+12 0.0 -1200.0
8882. Dphc4h8+ch3o2=phc4h8ojD+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8883. Cphc4h8+ch3o2=phc4h8ojC+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8884. Bphc4h8+ch3o2=phc4h8ojB+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8885. Aphc4h8+ch3o2=phc4h8ojA+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8886. Dphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojD+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8887. Cphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojC+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8888. Bphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojB+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8889. Aphc4h8+c2h5o2=phc4h8ojA+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8890. Dphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojD+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8891. Cphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojC+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8892. Bphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojB+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8893. Aphc4h8+nc3h7o2=phc4h8ojA+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8894. Dphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojD+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8895. Cphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojC+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8896. Bphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojB+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8897. Aphc4h8+ic3h7o2=phc4h8ojA+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
8898. Dphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojD+phc4h8ojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
8899. Cphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojC+phc4h8ojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
8900. Bphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojB+phc4h8ojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
8901. Aphc4h8+phc4h8qjD=phc4h8ojA+phc4h8ojD 1.90E+12 0.0 -1200.0
8902. Dphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojD+phc4h8ojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
8903. Cphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojC+phc4h8ojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
8904. Bphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojB+phc4h8ojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
8905. Aphc4h8+phc4h8qjC=phc4h8ojA+phc4h8ojC 1.90E+12 0.0 -1200.0
8906. Dphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojD+phc4h8ojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
8907. Cphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojC+phc4h8ojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
8908. Bphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojB+phc4h8ojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
8909. Aphc4h8+phc4h8qjB=phc4h8ojA+phc4h8ojB 1.90E+12 0.0 -1200.0
8910. Dphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojD+phc4h8ojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
8911. Cphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojC+phc4h8ojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
8912. Bphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojB+phc4h8ojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
8913. Aphc4h8+phc4h8qjA=phc4h8ojA+phc4h8ojA 1.90E+12 0.0 -1200.0
8914. phc4h8ojD=phhco+nc3h7 7.94E+14 0.0 15300.0

8915. phc4h8ojC=phch2+ethco 7.94E+14 0.0 15300.0
8916. phc4h8ojC=phch2hco+c2h5 7.94E+14 0.0 15300.0
8917. phc4h8ojB=ch3+phc2h4hco 7.94E+14 0.0 15300.0
8918. phc4h8ojB=ch3hco+Aphc2h4 7.94E+14 0.0 15300.0
8919. phc4h8ojA=ch2o+pbzjA 1.00E+15 0.0 21600.0
8920. phc4h8qjD=bbzqDrD 3.65E+13 0.0 32000.0
8921. phc4h8qjD=bbzqDrC 5.96E+12 0.0 27900.0
8922. phc4h8qjD=bbzqDrB 7.45E+11 0.0 22150.0
8923. phc4h8qjD=bbzqDrA 1.39E+11 0.0 21100.0
8924. phc4h8qjC=bbzqCrD 5.96E+12 0.0 27900.0
8925. phc4h8qjC=bbzqCrC 3.65E+13 0.0 32000.0
8926. phc4h8qjC=bbzqCrB 5.96E+12 0.0 27900.0
8927. phc4h8qjC=bbzqCrA 1.10E+12 0.0 23900.0
8928. phc4h8qjB=bbzqBrD 7.45E+11 0.0 15769.0
8929. phc4h8qjB=bbzqBrC 5.96E+12 0.0 27900.0
8930. phc4h8qjB=bbzqBrB 3.65E+13 0.0 32000.0
8931. phc4h8qjB=bbzqBrA 8.90E+12 0.0 29700.0
8932. phc4h8qjA=bbzqArD 9.31E+10 0.0 12969.0
8933. phc4h8qjA=bbzqArC 7.45E+11 0.0 22150.0
8934. phc4h8qjA=bbzqArB 5.96E+12 0.0 27900.0
8935. phc4h8qjA=bbzqArA 3.65E+13 0.0 32000.0
8936. phc4h8qjD+ho2=bbzqD+o2 1.00E+11 0.0 0.0
8937. phc4h8qjC+ho2=bbzqC+o2 1.00E+11 0.0 0.0
8938. phc4h8qjB+ho2=bbzqB+o2 1.00E+11 0.0 0.0
8939. phc4h8qjA+ho2=bbzqA+o2 1.00E+11 0.0 0.0
8940. phc4h8qjD+h2o2=bbzqD+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
8941. phc4h8qjC+h2o2=bbzqC+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
8942. phc4h8qjB+h2o2=bbzqB+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
8943. phc4h8qjA+h2o2=bbzqA+ho2 2.40E+12 0.0 10000.0
8944. phc4h8qjD+h2=bbzqD+h 3.01E+13 0.0 26030.0
8945. phc4h8qjC+h2=bbzqC+h 3.01E+13 0.0 26030.0
8946. phc4h8qjB+h2=bbzqB+h 3.01E+13 0.0 26030.0
8947. phc4h8qjA+h2=bbzqA+h 3.01E+13 0.0 26030.0
8948. phc4h8qjD+ch2o=bbzqD+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
8949. phc4h8qjC+ch2o=bbzqC+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
8950. phc4h8qjB+ch2o=bbzqB+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
8951. phc4h8qjA+ch2o=bbzqA+hco 5.60E+12 0.0 13600.0
8952. phc4h8qjD+ch3hco=bbzqD+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8953. phc4h8qjC+ch3hco=bbzqC+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8954. phc4h8qjB+ch3hco=bbzqB+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8955. phc4h8qjA+ch3hco=bbzqA+ch3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8956. phc4h8qjD+c2h6=bbzqD+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
8957. phc4h8qjC+c2h6=bbzqC+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
8958. phc4h8qjB+c2h6=bbzqB+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
8959. phc4h8qjA+c2h6=bbzqA+c2h5 1.70E+13 0.0 20460.0
8960. phc4h8qjD+c3h8=bbzqD+ic3h7 2.00E+12 0.0 17000.0
8961. phc4h8qjC+c3h8=bbzqC+ic3h7 2.00E+12 0.0 17000.0
8962. phc4h8qjB+c3h8=bbzqB+ic3h7 2.00E+12 0.0 17000.0
8963. phc4h8qjA+c3h8=bbzqA+ic3h7 2.00E+12 0.0 17000.0
8964. phc4h8qjD+c3h8=bbzqD+nc3h7 1.70E+13 0.0 20460.0
8965. phc4h8qjC+c3h8=bbzqC+nc3h7 1.70E+13 0.0 20460.0
8966. phc4h8qjB+c3h8=bbzqB+nc3h7 1.70E+13 0.0 20460.0
8967. phc4h8qjA+c3h8=bbzqA+nc3h7 1.70E+13 0.0 20460.0
8968. phc4h8qjD+c2h4=bbzqD+c2h3 1.13E+13 0.0 30430.0
8969. phc4h8qjC+c2h4=bbzqC+c2h3 1.13E+13 0.0 30430.0
8970. phc4h8qjB+c2h4=bbzqB+c2h3 1.13E+13 0.0 30430.0
8971. phc4h8qjA+c2h4=bbzqA+c2h3 1.13E+13 0.0 30430.0
8972. phc4h8qjD+ethco=bbzqD+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
8973. phc4h8qjC+ethco=bbzqC+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
8974. phc4h8qjB+ethco=bbzqB+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
8975. phc4h8qjA+ethco=bbzqA+c2h5co 2.00E+11 0.0 9500.0
8976. phc4h8qjD+acrol=bbzqD+c2h3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8977. phc4h8qjC+acrol=bbzqC+c2h3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8978. phc4h8qjB+acrol=bbzqB+c2h3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8979. phc4h8qjA+acrol=bbzqA+c2h3co 2.80E+12 0.0 13600.0
8980. phc4h8qjD+ch3oh=bbzqD+ch3o 6.30E+12 0.0 19360.0
8981. phc4h8qjC+ch3oh=bbzqC+ch3o 6.30E+12 0.0 19360.0
8982. phc4h8qjB+ch3oh=bbzqB+ch3o 6.30E+12 0.0 19360.0
8983. phc4h8qjA+ch3oh=bbzqA+ch3o 6.30E+12 0.0 19360.0
8984. phc4h8qjD+c3h6=bbzqD+ac3h5 3.24E+11 0.0 14900.0
8985. phc4h8qjC+c3h6=bbzqC+ac3h5 3.24E+11 0.0 14900.0
8986. phc4h8qjB+c3h6=bbzqB+ac3h5 3.24E+11 0.0 14900.0
8987. phc4h8qjA+c3h6=bbzqA+ac3h5 3.24E+11 0.0 14900.0
8988. phc4h8qjD+ch4=bbzqD+ch3 1.12E+13 0.0 24640.0
8989. phc4h8qjC+ch4=bbzqC+ch3 1.12E+13 0.0 24640.0
8990. phc4h8qjB+ch4=bbzqB+ch3 1.12E+13 0.0 24640.0
8991. phc4h8qjA+ch4=bbzqA+ch3 1.12E+13 0.0 24640.0
8992. phc4h8qjD+phhco=bbzqD+phco 5.60E+12 0.0 13600.0
8993. phc4h8qjC+phhco=bbzqC+phco 5.60E+12 0.0 13600.0
8994. phc4h8qjB+phhco=bbzqB+phco 5.60E+12 0.0 13600.0
8995. phc4h8qjA+phhco=bbzqA+phco 5.60E+12 0.0 13600.0
8996. phc4h8qjD+phch2hco=bbzqD+phch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
8997. phc4h8qjC+phch2hco=bbzqC+phch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
8998. phc4h8qjB+phch2hco=bbzqB+phch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
8999. phc4h8qjA+phch2hco=bbzqA+phch2co 2.80E+12 0.0 13600.0
9000. phc4h8qjD+phc2h4hco=bbzqD+phc2h4co 2.00E+11 0.0 9500.0
9001. phc4h8qjC+phc2h4hco=bbzqC+phc2h4co 2.00E+11 0.0 9500.0
9002. phc4h8qjB+phc2h4hco=bbzqB+phc2h4co 2.00E+11 0.0 9500.0
9003. phc4h8qjA+phc2h4hco=bbzqA+phc2h4co 2.00E+11 0.0 9500.0
9004. phc4h9+phc4h8qjD=Dphc4h8+bbzqC 2.66E+11 0.0 11269.0
9005. phc4h9+phc4h8qjD=Cphc4h8+bbzqC 1.12E+13 0.0 17700.0
9006. phc4h9+phc4h8qjD=Bphc4h8+bbzqC 1.12E+13 0.0 17700.0
9007. phc4h9+phc4h8qjD=Aphc4h8+bbzqC 1.70E+13 0.0 20460.0
9008. phc4h9+phc4h8qjC=Dphc4h8+bbzqC 2.66E+11 0.0 11269.0
9009. phc4h9+phc4h8qjC=Cphc4h8+bbzqC 1.12E+13 0.0 17700.0
9010. phc4h9+phc4h8qjC=Bphc4h8+bbzqC 1.12E+13 0.0 17700.0
9011. phc4h9+phc4h8qjC=Aphc4h8+bbzqC 1.70E+13 0.0 20460.0
9012. phc4h9+phc4h8qjB=Dphc4h8+bbzqB 2.66E+11 0.0 11269.0
9013. phc4h9+phc4h8qjB=Cphc4h8+bbzqB 1.12E+13 0.0 17700.0
9014. phc4h9+phc4h8qjB=Bphc4h8+bbzqB 1.12E+13 0.0 17700.0
9015. phc4h9+phc4h8qjB=Aphc4h8+bbzqB 1.70E+13 0.0 20460.0
9016. phc4h9+phc4h8qjA=Dphc4h8+bbzqA 2.66E+11 0.0 11269.0
9017. phc4h9+phc4h8qjA=Cphc4h8+bbzqA 1.12E+13 0.0 17700.0
9018. phc4h9+phc4h8qjA=Bphc4h8+bbzqA 1.12E+13 0.0 17700.0
9019. phc4h9+phc4h8qjA=Aphc4h8+bbzqA 1.70E+13 0.0 20460.0
9020. phc4h8qjD+ch3=phc4h8ojD+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9021. phc4h8qjC+ch3=phc4h8ojC+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9022. phc4h8qjB+ch3=phc4h8ojB+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9023. phc4h8qjA+ch3=phc4h8ojA+ch3o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9024. phc4h8qjD+c2h5=phc4h8ojD+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9025. phc4h8qjC+c2h5=phc4h8ojC+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9026. phc4h8qjB+c2h5=phc4h8ojB+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9027. phc4h8qjA+c2h5=phc4h8ojA+c2h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9028. phc4h8qjD+nc3h7=phc4h8ojD+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9029. phc4h8qjC+nc3h7=phc4h8ojC+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9030. phc4h8qjB+nc3h7=phc4h8ojB+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9031. phc4h8qjA+nc3h7=phc4h8ojA+nc3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9032. phc4h8qjD+ic3h7=phc4h8ojD+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9033. phc4h8qjC+ic3h7=phc4h8ojC+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9034. phc4h8qjB+ic3h7=phc4h8ojB+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9035. phc4h8qjA+ic3h7=phc4h8ojA+ic3h7o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9036. phc4h8qjD+ac3h5=phc4h8ojD+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9037. phc4h8qjC+ac3h5=phc4h8ojC+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9038. phc4h8qjB+ac3h5=phc4h8ojB+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9039. phc4h8qjA+ac3h5=phc4h8ojA+c3h5o 1.90E+12 0.0 -1200.0
9040. phc4h8qjD+ho2=phc4h8ojD+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9041. phc4h8qjC+ho2=phc4h8ojC+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9042. phc4h8qjB+ho2=phc4h8ojB+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9043. phc4h8qjA+ho2=phc4h8ojA+oh+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9044. phc4h8qjD+ch3o2=phc4h8ojD+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9045. phc4h8qjC+ch3o2=phc4h8ojC+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9046. phc4h8qjB+ch3o2=phc4h8ojB+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9047. phc4h8qjA+ch3o2=phc4h8ojA+ch3o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9048. phc4h8qjD+c2h5o2=phc4h8ojD+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9049. phc4h8qjC+c2h5o2=phc4h8ojC+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9050. phc4h8qjB+c2h5o2=phc4h8ojB+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9051. phc4h8qjA+c2h5o2=phc4h8ojA+c2h5o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9052. phc4h8qjD+nc3h7o2=phc4h8ojD+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9053. phc4h8qjC+nc3h7o2=phc4h8ojC+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9054. phc4h8qjB+nc3h7o2=phc4h8ojB+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9055. phc4h8qjA+nc3h7o2=phc4h8ojA+nc3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9056. phc4h8qjD+ic3h7o2=phc4h8ojD+ic3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9057. phc4h8qjC+ic3h7o2=phc4h8ojC+ic3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9058. phc4h8qjB+ic3h7o2=phc4h8ojB+ic3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9059. phc4h8qjA+ic3h7o2=phc4h8ojA+ic3h7o+o2 1.00E+11 0.0 0.0
9060. bbzqD=phc4h8ojD+oh 1.72E+20 -1.6 46050.0
9061. bbzqC=phc4h8ojC+oh 1.72E+20 -1.6 46050.0
9062. bbzqB=phc4h8ojB+oh 1.72E+20 -1.6 46050.0
9063. bbzqA=phc4h8ojA+oh 1.72E+20 -1.6 46050.0
9064. phc4h7-3+ho2=bbzqDrC 7.00E+10 0.0 7800.0
9065. phc4h7-3+ho2=bbzqCrD 7.00E+10 0.0 7800.0
9066. phc4h7-2+ho2=bbzqCrB 7.00E+10 0.0 7800.0
9067. phc4h7-2+ho2=bbzqBrC 7.00E+10 0.0 7800.0
9068. phc4h7-1+ho2=bbzqBrA 7.00E+10 0.0 7800.0
9069. phc4h7-1+ho2=bbzqArB 7.00E+10 0.0 7800.0
9070. phc4h7-3+c2h5o2=phc4h7o-CD+c2h5o 5.62E+11 0.0 12310.0
9071. phc4h7-2+c2h5o2=phc4h7o-BC+c2h5o 5.62E+11 0.0 12310.0
9072. phc4h7-1+c2h5o2=phc4h7o-AB+c2h5o 1.00E+12 0.0 14340.0
9073. phc4h7-3+nc3h7o2=phc4h7o-CD+nc3h7o 5.62E+11 0.0 12310.0
9074. phc4h7-2+nc3h7o2=phc4h7o-BC+nc3h7o 5.62E+11 0.0 12310.0
9075. phc4h7-1+nc3h7o2=phc4h7o-AB+nc3h7o 1.00E+12 0.0 14340.0
9076. phc4h7-3+ic3h7o2=phc4h7o-CD+ic3h7o 5.62E+11 0.0 12310.0
9077. phc4h7-2+ic3h7o2=phc4h7o-BC+ic3h7o 5.62E+11 0.0 12310.0
9078. phc4h7-1+ic3h7o2=phc4h7o-AB+ic3h7o 1.00E+12 0.0 14340.0
9079. phc4h7-3+ch3o2=phc4h7o-CD+ch3o 5.62E+11 0.0 12310.0
9080. phc4h7-2+ch3o2=phc4h7o-BC+ch3o 5.62E+11 0.0 12310.0
9081. phc4h7-1+ch3o2=phc4h7o-AB+ch3o 1.00E+12 0.0 14340.0
9082. phc4h7-3+phc4h8qjD=phc4h7o-CD+phc4h8ojD 5.62E+11 0.0 12310.0
9083. phc4h7-2+phc4h8qjD=phc4h7o-BC+phc4h8ojD 5.62E+11 0.0 12310.0
9084. phc4h7-1+phc4h8qjD=phc4h7o-AB+phc4h8ojD 1.00E+12 0.0 14340.0
9085. phc4h7-3+phc4h8qjC=phc4h7o-CD+phc4h8ojC 5.62E+11 0.0 12310.0
9086. phc4h7-2+phc4h8qjC=phc4h7o-BC+phc4h8ojC 5.62E+11 0.0 12310.0
9087. phc4h7-1+phc4h8qjC=phc4h7o-AB+phc4h8ojC 1.00E+12 0.0 14340.0
9088. phc4h7-3+phc4h8qjB=phc4h7o-CD+phc4h8ojB 5.62E+11 0.0 12310.0
9089. phc4h7-2+phc4h8qjB=phc4h7o-BC+phc4h8ojB 5.62E+11 0.0 12310.0
9090. phc4h7-1+phc4h8qjB=phc4h7o-AB+phc4h8ojB 1.00E+12 0.0 14340.0
9091. phc4h7-3+phc4h8qjA=phc4h7o-CD+phc4h8ojA 5.62E+11 0.0 12310.0
9092. phc4h7-2+phc4h8qjA=phc4h7o-BC+phc4h8ojA 5.62E+11 0.0 12310.0
9093. phc4h7-1+phc4h8qjA=phc4h7o-AB+phc4h8ojA 5.62E+11 0.0 12310.0
9094. phc4h7-3+oh=bbzohCrD 4.75E+12 0.0 -782.0
9095. phc4h7-3+oh=bbzohDrC 4.75E+12 0.0 -782.0
9096. phc4h7-2+oh=bbzohBrC 4.75E+12 0.0 -782.0
9097. phc4h7-2+oh=bbzohCrB 4.75E+12 0.0 -782.0
9098. phc4h7-1+oh=bbzohArB 4.75E+12 0.0 -782.0
9099. phc4h7-1+oh=bbzohBrA 4.75E+12 0.0 -782.0
9100. phc4h7-3+oh=phhco+nc3h7 2.60E+13 0.0 0.0
9101. phc4h7-3+oh=phch2+ethco 2.60E+13 0.0 0.0
9102. phc4h7-2+oh=phch2hco+c2h5 2.60E+13 0.0 0.0
9103. phc4h7-2+oh=Aphc2h4+ch3hco 2.60E+13 0.0 0.0
9104. phc4h7-1+oh=phc2h4hco+ch3 2.60E+13 0.0 0.0
9105. phc4h7-1+oh=pbzjA+ch2o 2.60E+13 0.0 0.0
9106. phc4h7-3+oh=Bphc4h6-3+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
9107. phc4h7-2+oh=Bphc4h6-3+h2o 6.00E+12 0.0 880.0
9108. phc4h7-1+oh=Cphc4h6-1+h2o 2.25E+13 0.0 2217.0
9109. phc4h7-1+oh=Dphc4h6-1+h2o 6.00E+12 0.0 880.0
9110. phc4h7-3+ho2=Bphc4h6-3+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
9111. phc4h7-2+ho2=Bphc4h6-3+h2o2 2.66E+11 0.0 11269.0
9112. phc4h7-1+ho2=Cphc4h6-1+h2o2 3.20E+12 0.0 14900.0
9113. phc4h7-1+ho2=Dphc4h6-1+h2o2 2.66E+11 0.0 11269.0
9114. phc4h7-3+Dphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9115. phc4h7-2+Dphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9116. phc4h7-1+Dphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9117. phc4h7-1+Dphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9118. phc4h7-3+Cphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9119. phc4h7-2+Cphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9120. phc4h7-1+Cphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9121. phc4h7-1+Cphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9122. phc4h7-3+Bphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9123. phc4h7-2+Bphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9124. phc4h7-1+Bphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9125. phc4h7-1+Bphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9126. phc4h7-3+Aphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9127. phc4h7-2+Aphc4h8=Bphc4h6-3+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9128. phc4h7-1+Aphc4h8=Cphc4h6-1+phc4h9 1.00E+11 0.0 7300.0
9129. phc4h7-1+Aphc4h8=Dphc4h6-1+phc4h9 6.72E+10 0.0 7214.0
9130. phc4h7-3+phc4h8qjD=Bphc4h6-3+bbzqD 1.40E+12 0.0 14900.0
9131. phc4h7-2+phc4h8qjD=Bphc4h6-3+bbzqD 2.66E+11 0.0 11269.0
9132. phc4h7-1+phc4h8qjD=Cphc4h6-1+bbzqD 1.40E+12 0.0 14900.0
9133. phc4h7-1+phc4h8qjD=Dphc4h6-1+bbzqD 2.66E+11 0.0 11269.0
9134. phc4h7-3+phc4h8qjC=Bphc4h6-3+bbzqC 1.40E+12 0.0 14900.0
9135. phc4h7-2+phc4h8qjC=Bphc4h6-3+bbzqC 2.66E+11 0.0 11269.0
9136. phc4h7-1+phc4h8qjC=Cphc4h6-1+bbzqC 1.40E+12 0.0 14900.0
9137. phc4h7-1+phc4h8qjC=Dphc4h6-1+bbzqC 2.66E+11 0.0 11269.0
9138. phc4h7-3+phc4h8qjB=Bphc4h6-3+bbzqB 1.40E+12 0.0 14900.0
9139. phc4h7-2+phc4h8qjB=Bphc4h6-3+bbzqB 2.66E+11 0.0 11269.0
9140. phc4h7-1+phc4h8qjB=Cphc4h6-1+bbzqB 1.40E+12 0.0 14900.0
9141. phc4h7-1+phc4h8qjB=Dphc4h6-1+bbzqB 2.66E+11 0.0 11269.0
9142. phc4h7-3+phc4h8qjA=Bphc4h6-3+bbzqA 1.40E+12 0.0 14900.0
9143. phc4h7-2+phc4h8qjA=Bphc4h6-3+bbzqA 2.66E+11 0.0 11269.0
9144. phc4h7-1+phc4h8qjA=Cphc4h6-1+bbzqA 1.40E+12 0.0 14900.0
9145. phc4h7-1+phc4h8qjA=Dphc4h6-1+bbzqA 2.66E+11 0.0 11269.0
9146. phc4h7-3+c2h5=Bphc4h6-3+c2h6 1.00E+11 0.0 7300.0
9147. phc4h7-2+c2h5=Bphc4h6-3+c2h6 6.72E+10 0.0 7214.0
9148. phc4h7-1+c2h5=Cphc4h6-1+c2h6 1.00E+11 0.0 7300.0
9149. phc4h7-1+c2h5=Dphc4h6-1+c2h6 6.72E+10 0.0 7214.0
9150. phc4h7-3+ic3h7=Bphc4h6-3+c3h8 1.00E+11 0.0 8300.0
9151. phc4h7-2+ic3h7=Bphc4h6-3+c3h8 6.72E+10 0.0 8214.0
9152. phc4h7-1+ic3h7=Cphc4h6-1+c3h8 1.00E+11 0.0 8300.0
9153. phc4h7-1+ic3h7=Dphc4h6-1+c3h8 6.72E+10 0.0 8214.0
9154. phc4h7-3+nc3h7=Bphc4h6-3+c3h8 1.00E+11 0.0 8300.0
9155. phc4h7-2+nc3h7=Bphc4h6-3+c3h8 6.72E+10 0.0 7214.0
9156. phc4h7-1+nc3h7=Cphc4h6-1+c3h8 1.00E+11 0.0 7300.0
9157. phc4h7-1+nc3h7=Dphc4h6-1+c3h8 6.72E+10 0.0 7214.0
9158. phc4h7-3+c2h3=Bphc4h6-3+c2h4 1.00E+11 0.0 8300.0

9159.	phc4h7-2+c2h3=Bphc4h6-3+c2h4	2.60E+12	0.0	6012.0
9160.	phc4h7-1+c2h3=Cphc4h6-1+c2h4	1.00E+11	0.0	8300.0
9161.	phc4h7-1+c2h3=Dphc4h6-1+c2h4	2.60E+12	0.0	6012.0
9162.	phc4h7-3+c2h5o2=Bphc4h6-3+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9163.	phc4h7-2+c2h5o2=Bphc4h6-3+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9164.	phc4h7-1+c2h5o2=Cphc4h6-1+c2h5o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9165.	phc4h7-1+c2h5o2=Dphc4h6-1+c2h5o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9166.	phc4h7-3+ac3h5=Bphc4h6-3+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
9167.	phc4h7-2+ac3h5=Bphc4h6-3+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
9168.	phc4h7-1+ac3h5=Cphc4h6-1+c3h6	7.90E+10	0.0	12400.0
9169.	phc4h7-1+ac3h5=Dphc4h6-1+c3h6	2.80E+12	0.0	11219.0
9170.	phc4h7-3+nc3h7o2=Bphc4h6-3+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9171.	phc4h7-2+nc3h7o2=Bphc4h6-3+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9172.	phc4h7-1+nc3h7o2=Cphc4h6-1+nc3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9173.	phc4h7-1+nc3h7o2=Dphc4h6-1+nc3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9174.	phc4h7-3+ic3h7o2=Bphc4h6-3+ic3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9175.	phc4h7-2+ic3h7o2=Bphc4h6-3+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9176.	phc4h7-1+ic3h7o2=Cphc4h6-1+ic3h7o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9177.	phc4h7-1+ic3h7o2=Dphc4h6-1+ic3h7o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9178.	phc4h7-3+ch3=Bphc4h6-3+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
9179.	phc4h7-2+ch3=Bphc4h6-3+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
9180.	phc4h7-1+ch3=Cphc4h6-1+ch4	1.00E+11	0.0	7300.0
9181.	phc4h7-1+ch3=Dphc4h6-1+ch4	1.90E+12	0.0	9010.0
9182.	phc4h7-3+ch3o2=Bphc4h6-3+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9183.	phc4h7-2+ch3o2=Bphc4h6-3+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9184.	phc4h7-1+ch3o2=Cphc4h6-1+ch3o2h	1.40E+12	0.0	14900.0
9185.	phc4h7-1+ch3o2=Dphc4h6-1+ch3o2h	2.66E+11	0.0	11269.0
9186.	phc4h7-3+h=Bphc4h6-3+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
9187.	phc4h7-2+h=Bphc4h6-3+h2	2.63E+14	0.0	8820.0
9188.	phc4h7-1+h=Cphc4h6-1+h2	5.00E+13	0.0	3900.0
9189.	phc4h7-1+h=Dphc4h6-1+h2	2.63E+14	0.0	8820.0
9190.	phc4h7-3+o=Bphc4h6-3+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
9191.	phc4h7-2+o=Bphc4h6-3+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
9192.	phc4h7-1+o=Cphc4h6-1+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
9193.	phc4h7-1+o=Dphc4h6-1+oh	4.00E+11	0.0	-2100.0
9194.	phc4h7o-CD+ch3=bbzoCrD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9195.	phc4h7o-CD+ch3=bbzoDrC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9196.	phc4h7o-BD+ch3=bbzoBrD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9197.	phc4h7o-BD+ch3=bbzoDrB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9198.	phc4h7o-AD+ch3=bbzoArD+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9199.	phc4h7o-AD+ch3=bbzoDrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9200.	phc4h7o-BC+ch3=bbzoBrC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9201.	phc4h7o-BC+ch3=bbzoCrB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9202.	phc4h7o-AC+ch3=bbzoArC+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9203.	phc4h7o-AC+ch3=bbzoCrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9204.	phc4h7o-AB+ch3=bbzoArB+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9205.	phc4h7o-AB+ch3=bbzoBrA+ch4	2.00E+11	0.0	10000.0
9206.	phc4h7o-CD+ch3o2=bbzoCrD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9207.	phc4h7o-CD+ch3o2=bbzoDrC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9208.	phc4h7o-BD+ch3o2=bbzoBrD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9209.	phc4h7o-BD+ch3o2=bbzoDrB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9210.	phc4h7o-AD+ch3o2=bbzoArD+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9211.	phc4h7o-AD+ch3o2=bbzoDrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9212.	phc4h7o-BC+ch3o2=bbzoBrC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9213.	phc4h7o-BC+ch3o2=bbzoCrB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9214.	phc4h7o-AC+ch3o2=bbzoArC+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9215.	phc4h7o-AC+ch3o2=bbzoCrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9216.	phc4h7o-AB+ch3o2=bbzoArB+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9217.	phc4h7o-AB+ch3o2=bbzoBrA+ch3o2h	1.00E+13	0.0	19000.0
9218.	phc4h7o-CD+h=bbzoCrD+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9219.	phc4h7o-CD+h=bbzoDrC+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9220.	phc4h7o-BD+h=bbzoBrD+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9221.	phc4h7o-BD+h=bbzoDrB+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9222.	phc4h7o-AD+h=bbzoArD+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9223.	phc4h7o-AD+h=bbzoDrA+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9224.	phc4h7o-BC+h=bbzoBrC+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9225.	phc4h7o-BC+h=bbzoCrB+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9226.	phc4h7o-AC+h=bbzoArC+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9227.	phc4h7o-AC+h=bbzoCrA+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9228.	phc4h7o-AB+h=bbzoArB+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9229.	phc4h7o-AB+h=bbzoBrA+h2	2.00E+13	0.0	8300.0
9230.	phc4h7o-CD+ho2=bbzoCrD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9231.	phc4h7o-CD+ho2=bbzoDrC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9232.	phc4h7o-BD+ho2=bbzoBrD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9233.	phc4h7o-BD+ho2=bbzoDrB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9234.	phc4h7o-AD+ho2=bbzoArD+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9235.	phc4h7o-AD+ho2=bbzoDrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9236.	phc4h7o-BC+ho2=bbzoBrC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9237.	phc4h7o-BC+ho2=bbzoCrB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9238.	phc4h7o-AC+ho2=bbzoArC+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9239.	phc4h7o-AC+ho2=bbzoCrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9240.	phc4h7o-AB+ho2=bbzoArB+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9241.	phc4h7o-AB+ho2=bbzoBrA+h2o2	4.00E+12	0.0	17000.0
9242.	phc4h7o-CD+o=bbzoCrD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9243.	phc4h7o-CD+o=bbzoDrC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9244.	phc4h7o-BD+o=bbzoBrD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9245.	phc4h7o-BD+o=bbzoDrB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9246.	phc4h7o-AD+o=bbzoArD+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9247.	phc4h7o-AD+o=bbzoDrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9248.	phc4h7o-BC+o=bbzoBrC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9249.	phc4h7o-BC+o=bbzoCrB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9250.	phc4h7o-AC+o=bbzoArC+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9251.	phc4h7o-AC+o=bbzoCrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9252.	phc4h7o-AB+o=bbzoArB+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9253.	phc4h7o-AB+o=bbzoBrA+oh	5.00E+12	0.0	0.0
9254.	phc4h7o-CD+oh=bbzoCrD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9255.	phc4h7o-CD+oh=bbzoDrC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9256.	phc4h7o-BD+oh=bbzoBrD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9257.	phc4h7o-BD+oh=bbzoDrB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9258.	phc4h7o-AD+oh=bbzoArD+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9259.	phc4h7o-AD+oh=bbzoDrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9260.	phc4h7o-BC+oh=bbzoBrC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9261.	phc4h7o-BC+oh=bbzoCrB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9262.	phc4h7o-AC+oh=bbzoArC+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9263.	phc4h7o-AC+oh=bbzoCrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9264.	phc4h7o-AB+oh=bbzoArB+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9265.	phc4h7o-AB+oh=bbzoBrA+h2o	1.18E+13	0.0	3610.0
9266.	acrol+phch2=bbzoArB	1.32E+04	2.5	6130.0
9267.	ch2co+Aphc2h4=bbzoBrA	1.76E+04	2.5	6130.0
9268.	ac3h5hco+c6h5=bbzoArC	1.32E+04	2.5	6130.0
9269.	hco+phc3h5-1=bbzoArC	1.00E+11	0.0	7800.0
9270.	c2h4+phch2co=bbzoCrA	1.00E+11	0.0	7800.0
9271.	styren+ch2hco=bbzoArD	1.32E+04	2.5	6130.0
9272.	c2h4+phcoch2=bbzoDrA	1.32E+04	2.5	6130.0
9273.	mvk+c6h5=bbzoBrC	1.32E+04	2.5	6130.0
9274.	phch2+ch3chco=bbzoCrB	1.76E+04	2.5	6130.0
9275.	styren+ch3co=bbzoBrD	1.00E+11	0.0	7800.0
9276.	phco+c3h6=bbzoDrB	1.00E+11	0.0	7800.0
9277.	bbzoCrD+o=phhco+c2h5co	2.00E+14	0.0	0.0
9278.	bbzoCrD+ho2=phhco+c2h5co+oh	1.00E+13	0.0	0.0
9279.	bbzoCrD+o2=phhco+c2h5+co2	1.23E+36	-7.2	33600.0
9280.	ch3+phcoc2h3=bbzoDrC	1.32E+04	2.5	6130.0
9281.	c6h5+ch2co=phch2co	1.76E+04	2.5	6130.0
9282.	bbzohCrD+o2=bbzohCqjD	4.58E+11	0.0	-378.0
9283.	bbzohDrC+o2=bbzohDqjC	2.00E+12	0.0	0.0
9284.	bbzohCrB+o2=bbzohCqjB	2.00E+12	0.0	0.0
9285.	bbzohBrC+o2=bbzohBqjC	2.00E+12	0.0	0.0
9286.	bbzohBrA+o2=bbzohBqjA	2.00E+12	0.0	0.0
9287.	bbzohArB+o2=bbzohAqjB	2.00E+12	0.0	0.0
9288.	bbzohCqjD=>phhco+ethco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9289.	bbzohDqjC=>phhco+ethco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9290.	bbzohCqjB=>phch2hco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9291.	bbzohBqjC=>phch2hco+ch3hco+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9292.	bbzohBqjA=>phc2h4hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9293.	bbzohAqjB=>phc2h4hco+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	25000.0
9294.	bbzqDrC=>phc4h7o-CD+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9295.	bbzqDrB=>phc4h7o-BD+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
9296.	bbzqDrA=>phc4h7o-AD+oh	5.20E+08	0.0	6500.0
9297.	bbzqCrD=>phc4h7o-CD+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9298.	bbzqCrB=>phc4h7o-BC+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9299.	bbzqCrA=>phc4h7o-AC+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
9300.	bbzqBrD=>phc4h7o-BD+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
9301.	bbzqBrC=>phc4h7o-BC+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9302.	bbzqBrA=>phc4h7o-AB+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9303.	bbzqArD=>phc4h7o-AD+oh	5.20E+08	0.0	6500.0
9304.	bbzqArC=>phc4h7o-AC+oh	2.50E+10	0.0	15250.0
9305.	bbzqArB=>phc4h7o-AB+oh	2.95E+11	0.0	22000.0
9306.	bbzqDrD=>bbzoD+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
9307.	bbzqCrC=>bbzoC+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
9308.	bbzqBrB=>bbzoB+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
9309.	bbzqArA=>bbzoA+oh	3.00E+11	0.0	22000.0
9310.	bbzqDrB=phhco+c3h6+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
9311.	bbzqCrA=phch2hco+c2h4+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
9312.	bbzqBrD=styren+ch3hco+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
9313.	bbzqArC=phc3h5-1+ch2o+oh	5.00E+13	0.0	25500.0
9314.	bbzqDrC+o2=bbzqDqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
9315.	bbzqDrB+o2=bbzqDqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
9316.	bbzqDrA+o2=bbzqDqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
9317.	bbzqCrD+o2=bbzqCqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
9318.	bbzqCrB+o2=bbzqCqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
9319.	bbzqCrA+o2=bbzqCqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
9320.	bbzqBrD+o2=bbzqBqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
9321.	bbzqBrC+o2=bbzqBqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
9322.	bbzqBrA+o2=bbzqBqjA	4.82E+36	-8.2	5167.0
9323.	bbzqArD+o2=bbzqAqjD	2.43E+39	-9.0	8620.0
9324.	bbzqArC+o2=bbzqAqjC	1.84E+45	-11.1	6538.0
9325.	bbzqArB+o2=bbzqAqjB	1.84E+45	-11.1	6538.0
9326.	bbzqDqjC=>bbzoDqC+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
9327.	bbzqDqjB=>bbzoDqB+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
9328.	bbzqDqjA=>bbzoDqA+oh	6.87E+09	0.0	18100.0
9329.	bbzqCqjD=>bbzoCqD+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
9330.	bbzqCqjB=>bbzoCqB+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
9331.	bbzqCqjA=>bbzoCqA+oh	4.12E+10	0.0	19150.0
9332.	bbzqBqjD=>bbzoBqD+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
9333.	bbzqBqjC=>bbzoBqC+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
9334.	bbzqBqjA=>bbzoBqA+oh	4.95E+11	0.0	24900.0
9335.	bbzqAqjD=>bbzoAqD+oh	6.87E+09	0.0	18100.0
9336.	bbzqAqjC=>bbzoAqC+oh	8.23E+10	0.0	20900.0
9337.	bbzqAqjB=>bbzoAqB+oh	9.88E+11	0.0	26700.0
9338.	Bphc4h6-3+ho2=bbze3ojB+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
9339.	Cphc4h6-1+ho2=bbze1ojC+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
9340.	Dphc4h6-1+ho2=bbze1ojD+oh	1.90E+12	0.0	-1200.0
9341.	Bphc4h6-3+c2h5o2=bbze3ojB+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9342.	Cphc4h6-1+c2h5o2=bbze1ojC+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9343.	Dphc4h6-1+c2h5o2=bbze1ojD+c2h5o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9344.	Bphc4h6-3+nc3h7o2=bbze3ojB+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9345.	Cphc4h6-1+nc3h7o2=bbze1ojC+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9346.	Dphc4h6-1+nc3h7o2=bbze1ojD+nc3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9347.	Bphc4h6-3+ic3h7o2=bbze3ojB+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9348.	Cphc4h6-1+ic3h7o2=bbze1ojC+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9349.	Dphc4h6-1+ic3h7o2=bbze1ojD+ic3h7o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9350.	Bphc4h6-3+ch3o2=bbze3ojB+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9351.	Cphc4h6-1+ch3o2=bbze1ojC+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9352.	Dphc4h6-1+ch3o2=bbze1ojD+ch3o	1.90E+12	0.0	-1200.0
9353.	Bphc4h6-3+phc4h8qjD=bbze3ojB+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
9354.	Cphc4h6-1+phc4h8qjD=bbze1ojC+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
9355.	Dphc4h6-1+phc4h8qjD=bbze1ojD+phc4h8ojD	1.90E+12	0.0	-1200.0
9356.	Bphc4h6-3+phc4h8qjC=bbze3ojB+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
9357.	Cphc4h6-1+phc4h8qjC=bbze1ojC+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
9358.	Dphc4h6-1+phc4h8qjC=bbze1ojD+phc4h8ojC	1.90E+12	0.0	-1200.0
9359.	Bphc4h6-3+phc4h8qjB=bbze3ojB+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
9360.	Cphc4h6-1+phc4h8qjB=bbze1ojC+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
9361.	Dphc4h6-1+phc4h8qjB=bbze1ojD+phc4h8ojB	1.90E+12	0.0	-1200.0
9362.	Bphc4h6-3+phc4h8qjA=bbze3ojB+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
9363.	Cphc4h6-1+phc4h8qjA=bbze1ojC+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
9364.	Dphc4h6-1+phc4h8qjA=bbze1ojD+phc4h8ojA	1.90E+12	0.0	-1200.0
9365.	Bphc4h6-3+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
9366.	Cphc4h6-1+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
9367.	Dphc4h6-1+o2=phc4h5+ho2	1.20E+12	0.0	38344.0
9368.	Bphc4h6-3+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
9369.	Cphc4h6-1+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
9370.	Dphc4h6-1+oh=phc4h5+h2o	6.00E+12	0.0	880.0
9371.	Bphc4h6-3+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
9372.	Cphc4h6-1+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
9373.	Dphc4h6-1+ho2=phc4h5+h2o2	2.66E+11	0.0	11269.0
9374.	Bphc4h6-3+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9375.	Cphc4h6-1+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9376.	Dphc4h6-1+Dphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9377.	Bphc4h6-3+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9378.	Cphc4h6-1+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9379.	Dphc4h6-1+Cphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9380.	Bphc4h6-3+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9381.	Cphc4h6-1+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9382.	Dphc4h6-1+Bphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9383.	Bphc4h6-3+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9384.	Cphc4h6-1+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9385.	Dphc4h6-1+Aphc4h8=phc4h5+phc4h9	3.98E+12	0.0	0.0
9386.	Bphc4h6-3+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
9387.	Cphc4h6-1+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
9388.	Dphc4h6-1+phc4h8qjD=phc4h5+bbzqD	2.66E+11	0.0	11269.0
9389.	Bphc4h6-3+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
9390.	Cphc4h6-1+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
9391.	Dphc4h6-1+phc4h8qjC=phc4h5+bbzqC	2.66E+11	0.0	11269.0
9392.	Bphc4h6-3+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
9393.	Cphc4h6-1+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
9394.	Dphc4h6-1+phc4h8qjB=phc4h5+bbzqB	2.66E+11	0.0	11269.0
9395.	Bphc4h6-3+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
9396.	Cphc4h6-1+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
9397.	Dphc4h6-1+phc4h8qjA=phc4h5+bbzqA	2.66E+11	0.0	11269.0
9398.	Bphc4h6-3+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
9399.	Cphc4h6-1+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
9400.	Dphc4h6-1+c2h5=phc4h5+c2h6	3.98E+12	0.0	0.0
9401.	Bphc4h6-3+ic3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0
9402.	Cphc4h6-1+ic3h7=phc4h5+c3h8	3.98E+12	0.0	0.0

```
9403. Dphc4h6-1+ic3h7=phc4h5+c3h8                3.98E+12    0.0        0.0
9404. Bphc4h6-3+nc3h7=phc4h5+c3h8                3.98E+12    0.0        0.0
9405. Cphc4h6-1+nc3h7=phc4h5+c3h8                3.98E+12    0.0        0.0
9406. Dphc4h6-1+nc3h7=phc4h5+c3h8                3.98E+12    0.0        0.0
9407. Bphc4h6-3+c2h3=phc4h5+c2h4                 3.98E+12    0.0        0.0
9408. Cphc4h6-1+c2h3=phc4h5+c2h4                 3.98E+12    0.0        0.0
9409. Dphc4h6-1+c2h3=phc4h5+c2h4                 3.98E+12    0.0        0.0
9410. Bphc4h6-3+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h            2.66E+11    0.0    11269.0
9411. Cphc4h6-1+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h            2.66E+11    0.0    11269.0
9412. Dphc4h6-1+c2h5o2=phc4h5+c2h5o2h            2.66E+11    0.0    11269.0
9413. Bphc4h6-3+ac3h5=phc4h5+c3h6                6.31E+12    0.0        0.0
9414. Cphc4h6-1+ac3h5=phc4h5+c3h6                6.31E+12    0.0        0.0
9415. Dphc4h6-1+ac3h5=phc4h5+c3h6                6.31E+12    0.0        0.0
9416. Bphc4h6-3+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9417. Cphc4h6-1+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9418. Dphc4h6-1+nc3h7o2=phc4h5+nc3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9419. Bphc4h6-3+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9420. Cphc4h6-1+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9421. Dphc4h6-1+ic3h7o2=phc4h5+ic3h7o2h          2.66E+11    0.0    11269.0
9422. Bphc4h6-3+ch3=phc4h5+ch4                   8.00E+12    0.0        0.0
9423. Cphc4h6-1+ch3=phc4h5+ch4                   8.00E+12    0.0        0.0
9424. Dphc4h6-1+ch3=phc4h5+ch4                   8.00E+12    0.0        0.0
9425. Bphc4h6-3+ch3o2=phc4h5+ch3o2h              2.66E+11    0.0    11269.0
9426. Cphc4h6-1+ch3o2=phc4h5+ch3o2h              2.66E+11    0.0    11269.0
9427. Dphc4h6-1+ch3o2=phc4h5+ch3o2h              2.66E+11    0.0    11269.0
9428. Bphc4h6-3+h=phc4h5+h2                      3.16E+13    0.0        0.0
9429. Cphc4h6-1+h=phc4h5+h2                      3.16E+13    0.0        0.0
9430. Dphc4h6-1+h=phc4h5+h2                      3.16E+13    0.0        0.0
9431. Bphc4h6-3+o=phc4h5+oh                      4.00E+11    0.0    -2100.0
9432. Cphc4h6-1+o=phc4h5+oh                      4.00E+11    0.0    -2100.0
9433. Dphc4h6-1+o=phc4h5+oh                      4.00E+11    0.0    -2100.0
9434. bbze3ojB=ASTYRYL+ch3hco                    7.94E+14    0.0    19000.0
9435. bbze3ojB=phc2h2hco+ch3                     7.94E+14    0.0    19000.0
9436. bbze1ojC=phch2hco+c2h3                     7.94E+14    0.0    19000.0
9437. bbze1ojC=phch2+acrol                       7.94E+14    0.0    19000.0
9438. bbze1ojD=phhco+ac3h5                       7.94E+14    0.0    19000.0
9439. bbzoDqC=>phco+ethco+oh                     1.00E+16    0.0    43000.0
9440. bbzoDqB=>phcoch2+ch3hco+oh                 1.00E+16    0.0    43000.0
9441. bbzoDqA=>phcoc2h4+ch2o+oh                  1.00E+16    0.0    43000.0
9442. bbzoCqD=>phhco+c2h5co+oh                   1.00E+16    0.0    43000.0
9443. bbzoCqB=>phch2co+ch3hco+oh                 1.00E+16    0.0    43000.0
9444. bbzoCqA=>phch2coch2+ch2o+oh                1.00E+16    0.0    43000.0
9445. bbzoBqD=>phhco+ch2coch3+oh                 1.00E+16    0.0    43000.0
9446. bbzoBqC=>phch2hco+ch3co+oh                 1.00E+16    0.0    43000.0
9447. bbzoBqA=>phc2h4co+ch2o+oh                  1.00E+16    0.0    43000.0
9448. bbzoAqD=>phhco+ch2ch2hco+oh                1.00E+16    0.0    43000.0
9449. bbzoAqC=>phch2hco+ch2hco+oh                1.00E+16    0.0    43000.0
9450. bbzoAqB=>phc2h4hco+hco+oh                  1.00E+16    0.0    43000.0
9451. c6e5oA+c2h5co=Mec8oor                      1.32E+04    2.5     6130.0

NOTE:  A units mole-cm-sec-K, E units cal/mole
```

```
THERMO
   300.000  1000.000  5000.000
h                       h   2o   0c   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29914200E+01 0.70006000E-03-0.56340000E-07-0.92300000E-11 0.15800000E-14    2
-0.83500000E+03-0.13550000E+01 0.32981200E+01 0.82494000E-03-0.81430000E-06    3
-0.94750000E-10 0.41349000E-12-0.10125000E+04-0.32940000E+01                   4
o2 REF ELEMENT    RUS 89o   20   00   00   0G   200.000  6000.00  1000.0      1
 3.66096083E+00 6.56365523E-04-1.41149485E-07 2.05797658E-11-1.29913248E-15    2
-1.21597725E+03 3.41536184E+00 3.78245636E+00-2.99673415E-03 9.84730200E-06    3
-9.68129508E-09 3.24372836E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00 0.00000000E+00    4
h                       h   1o   0c   0    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
 0.25471600E+05-0.46000000E+00 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.25471600E+05-0.46000000E+00                   4
o                       o   1h   0c   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25420600E+01-0.27550000E-04-0.31000000E-08 0.45500000E-11-0.44000000E-15    2
 0.29230800E+05 0.49200000E+01 0.29464300E+01-0.16381700E-02 0.24210300E-05    3
-0.16028400E-08 0.38907000E-12 0.29147600E+05 0.29640000E+01                   4
oh                      h   1o   10   00   0G   200.00   6000.00  1000.00      1
 2.83853033E+00 1.10741289E-03-2.94000209E-07 4.20698729E-11-2.42289890E-15    2
 3.69780808E+03 5.84494652E+00 3.99198424E+00-2.40106655E-03 4.61664033E-06    3
-3.87916306E-09 1.36319502E-12 3.36889836E+03-1.03998477E-01 4.48613328E+03    4
ho2                     h   1o   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40721900E+01 0.21313000E-02-0.53081000E-06 0.61120000E-10-0.28400000E-14    2
-0.15800000E+03 0.34760000E+01 0.29799600E+01 0.49967000E-02-0.37910000E-05    3
 0.23541900E-08-0.80899000E-12 0.17620000E+03 0.92230000E+01                   4
h2o                     h   2o   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.26721500E+01 0.30562900E-02-0.87303000E-06 0.12010000E-09-0.63900000E-14    2
-0.29899200E+05 0.68630000E+01 0.33868400E+01 0.34749800E-02-0.63547000E-05    3
 0.69685800E-08-0.25065900E-11-0.30208100E+05 0.25900000E+01                   4
h2o2                    h   2o   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45731700E+01 0.43361400E-02-0.14746900E-05 0.23489000E-09-0.14320000E-13    2
-0.18007000E+05 0.50100000E+00 0.33887500E+01 0.65692300E-02-0.14850000E-06    3
-0.46258100E-08 0.24715100E-11-0.17663100E+05 0.67850000E+01                   4
n2                      n   2o   0c   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29266400E+01 0.14879800E-02-0.56848000E-06 0.10097000E-09-0.67500000E-14    2
-0.92280000E+03 0.59810000E+01 0.32986800E+01 0.14082400E-02-0.39632200E-05    3
 0.56415100E-08-0.24448500E-11-0.10209000E+04 0.39500000E+01                   4
ar                      ar  10   00   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.74540000E+03 0.43660000E+01 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.74540000E+03 0.43660000E+01                   4
! Base C1
co                      c   1o   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30250800E+01 0.14426900E-02-0.56308000E-06 0.10186000E-09-0.69100000E-14    2
-0.14268300E+05 0.61080000E+01 0.32624500E+01 0.15119400E-02-0.38817500E-05    3
 0.55819400E-08-0.24749500E-11-0.14310500E+05 0.48490000E+01                   4
co2                     c   1o   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44536200E+01 0.31401700E-02-0.12784100E-05 0.23940000E-09-0.16690000E-13    2
-0.48967000E+05-0.95500000E+00 0.22757200E+01 0.99220700E-02-0.10409110E-04    3
 0.68666900E-08-0.21172800E-11-0.48373100E+05 0.10188000E+02                   4
ch4                     c   1h   40   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16834800E+01 0.10237240E-01-0.38751300E-05 0.67856000E-09-0.45030000E-13    2
-0.10080800E+05 0.96230000E+01 0.77874000E+00 0.17476680E-01-0.27834090E-04    3
 0.30497080E-07-0.12239310E-10-0.98252000E+04 0.13722000E+02                   4
ch3                     c   1h   30   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28440500E+01 0.61379700E-02-0.22303500E-05 0.37852000E-09-0.24520000E-13    2
 0.16437800E+05 0.54530000E+01 0.24304400E+01 0.11124100E-01-0.16802200E-04    3
 0.16218290E-07-0.58649500E-11 0.16423800E+05 0.67900000E+01                   4
ch2                     c   1h   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36364100E+01 0.19330600E-02-0.16870000E-06-0.10099000E-09 0.18080000E-13    2
 0.45341300E+05 0.21565600E+01 0.37622400E+01 0.11598200E-02 0.24896000E-06    3
 0.88008000E-09-0.73324000E-12 0.45367900E+05 0.17125800E+01                   4
sch2                    c   1h   20   00   0G   300.00   4000.00  1000.00      1
 0.35528886E+01 0.20667883E-02-0.19141160E-06-0.11046734E-09 0.20213496E-13    2
 0.49849754E+05 0.16865700E+01 0.39712651E+01-0.16990888E-03 0.10253689E-05    3
 0.24925508E-08-0.19812663E-11 0.49893676E+05 0.57532072E-01                   4
ch                      c   1h   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21962200E+01 0.23403800E-02-0.70582000E-06 0.90080000E-10-0.38600000E-14    2
 0.70867200E+05 0.91780000E+01 0.32002000E+01 0.20728800E-02-0.51344300E-05    3
 0.57338900E-08-0.19555300E-11 0.70452600E+05 0.33320000E+01                   4
C                       c   10   00   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.26020990E+01-0.17871001E-03 0.90870009E-07-0.11500002E-10 0.33000006E-15    2
 0.85421500E+05 0.41950000E+01 0.24998580E+01 0.80860004E-04-0.26977003E-06    3
 0.30407004E-09-0.11066002E-12 0.85458800E+05 0.47530000E+01                   4
ch3oh                   c   1h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40290600E+01 0.93765900E-02-0.30502500E-05 0.43588000E-09-0.22250000E-13    2
-0.26157900E+05 0.23780000E+01 0.26601200E+01 0.73415100E-02 0.71700500E-05    3
-0.87931900E-08 0.23905700E-11-0.25353500E+05 0.11233000E+02                   4
ch3o                    c   1h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.37708000E+01 0.78715000E-02-0.26563800E-05 0.39444000E-09-0.21130000E-13    2
 0.12780000E+03 0.29300000E+01 0.21062000E+01 0.72166000E-02 0.53384700E-05    3
-0.73776400E-08 0.20756100E-11 0.97860000E+03 0.13152000E+02                   4
ch2oh      7/29/ 8 LECoNc   1h   3o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    01
 5.87492023E+00 4.90306661E-03-1.63365829E-06 2.69287253E-10-1.67785355E-14    2
-4.53368423E+03-6.40569428E+00 2.61996550E+00 1.26872510E-02-8.90436910E-06    3
 3.42665195E-09-5.51810469E-13-3.41179550E+03 1.10272906E+01                   4
ch2o                    c   1h   2o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29956100E+01 0.66813200E-02-0.26289500E-05 0.47372000E-09-0.32130000E-13    2
-0.15320400E+05 0.69130000E+01 0.16527300E+01 0.12631440E-01-0.18881680E-04    3
 0.20500310E-07-0.84132400E-11-0.14865400E+05 0.13785000E+02                   4
hco                     c   1h   1o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35572700E+01 0.33455700E-02-0.13350100E-05 0.24706000E-09-0.17140000E-13    2
 0.39163000E+04 0.55520000E+01 0.28983300E+01 0.61991500E-02-0.96230800E-05    3
 0.10898250E-07-0.45748900E-11 0.41599000E+04 0.89840000E+01                   4
ch3o2                   c   1h   3o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.80089150E+01 0.54692410E-02-0.12433920E-05 0.14918130E-09-0.76185330E-14    2
-0.11378690E+04-0.16874040E+02 0.17353390E+01 0.22200340E-01-0.18841460E-04    3
 0.95013140E-08-0.22172690E-11 0.74007890E+03 0.15965260E+02                   4
ch3o2h                  c   1h   4o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.73164230E+01 0.92366200E-02-0.30210870E-05 0.46897720E-09-0.28359530E-13    2
-0.18810540E+05-0.11466670E+02 0.29100540E+01 0.19374380E-01-0.10636570E-04    3
 0.23534770E-08-0.33023910E-13-0.17404750E+05 0.12014430E+02                   4
hco3                    c   1h   1o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.91176840E+01 0.27871830E-02-0.52462370E-06 0.53504280E-10-0.23907250E-14    2
-0.43973150E+05-0.19574780E+02 0.26673050E+01 0.21311320E-01-0.20434550E-04    3
 0.98506450E-08-0.19626470E-11-0.42205430E+05 0.13638040E+02                   4
hco3h                   c   1h   2o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.85022780E+01 0.67543840E-02-0.26766570E-05 0.49413330E-09-0.34278630E-13    2
-0.69682190E+05-0.16151440E+02 0.41700850E+01 0.15797880E-01-0.44609940E-05    3
-0.66219210E-08 0.41548100E-11-0.68335760E+05 0.69477160E+01                   4
ho2cho     6/26/95 thermc   1h   2o   3    0g   300.000  5000.000 1378.00    21
 9.87503878e+00 4.64663708e-03-1.67230522e-06 2.68624413e-10-1.59595232e-14    2
-3.80502496e+04-2.24939155e+01 2.42464726e+00 2.19706380e-02-1.68705546e-05    3
 6.25612194e-09-9.11645843e-13-3.54828006e+04 1.75027796e+01                   4
o2cho      6/26/95 thermc   1h   1o   3    0g   300.000  5000.000 1368.00    11
 7.24075139e+00 4.63312951e-03-1.63693995e-06 2.59706693e-10-1.52964699e-14    2
-1.87027618e+04-6.49547212e+00 3.96059309e+00 1.06002279e-02-5.25713351e-06    3
 1.01716726e-09-2.87487602e-14-1.73599383e+04 1.17807483e+01                   4
ocho       2/14/95 thermc   1h   1o   2    0g   300.000  5000.000 1690.00    01
 6.12628782e+00 3.75602932e-03-1.42010352e-06 2.36429200e-10-1.44167651e-14    2
-2.17698466e+04-8.01574694e+00 1.35213452e+00 1.50082004e-02-1.09896141e-05    3
 3.73679840e-09-4.81014498e-13-2.02253647e+04 1.74373147e+01                   4
hoch2o     4/ 9/98 thermc   1h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1452.000    11
 6.39521515e+00 7.43673043e-03-2.50422354e-06 3.84879712e-10-2.21778689e-14    2
-2.25557758e+04-6.63865583e+00 4.11183145e+00 7.53850697e-03 3.77337370e-06    3
-5.38746005e-09 1.45615887e-12-2.12471918e+04 7.46807254e+00                   4
hocho      4/ 9/98 thermc   1h   2o   2    0g   300.000  5000.000 1376.000    11
 6.68733013e+00 5.14289368e-03-1.82238513e-06 2.89719163e-10-1.70892199e-14    2
-4.83995400e+04-1.13104798e+01 1.43548185e+00 1.63363016e-02-1.06257421e-05    3
 3.32132977e-09-4.02176103e-13-4.64616504e+04 1.72885798e+01                   4
! Base c2
c2h6                    c   2h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.48259400E+01 0.13840430E-01-0.45572600E-05 0.67250000E-09-0.35980000E-13    2
-0.12717800E+05-0.52400000E+01 0.14625400E+01 0.15494670E-01 0.57805100E-05    3
-0.12578320E-07 0.45862700E-11-0.11239200E+05 0.14432000E+02                   4
c2h4               121286c   2h   4          g  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.03528419e+02 0.01148518e+00-0.04418385e-04 0.07844601e-08-0.05266848e-12    2
 0.04428289e+05 0.02230389e+02-0.08614880e+01 0.02796163e+00-0.03388677e-03    3
 0.02785152e-06-0.09737879e-10 0.05573046e+05 0.02421149e+03                   4
c2h5                12387c   2h   5          g  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.07190480e+02 0.06484077e-01-0.06428065e-05-0.02347879e-08 0.03880877e-12    2
 0.01067455e+06-0.01478089e+03 0.02690702e+02 0.08719133e-01 0.04419839e-04    3
 0.09338703e-08-0.03927773e-10 0.01287040e+06 0.01213820e+03                   4
c2h3                    c   2h   30   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36476530E+01 0.80337780E-02-0.27644990E-05 0.47530900E-09-0.31644080E-13    2
 0.34468830E+05 0.47227800E+01 0.21388110E+01 0.87182220E-02 0.38589800E-05    3
-0.93659150E-08 0.40104980E-11 0.35079500E+05 0.13419180E+02                   4
c2h2                    c   2h   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44367700E+01 0.53760400E-02-0.19128200E-05 0.32864000E-09-0.21570000E-13    2
 0.25667700E+05-0.28000000E+01 0.20135600E+01 0.15190450E-01-0.16163190E-04    3
 0.90789900E-08-0.19127500E-11 0.26124400E+05 0.88050000E+01                   4
c2h                     c   2h   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44276900E+01 0.22162700E-02-0.60490000E-06 0.98830000E-10-0.73500000E-14    2
 0.65904100E+05-0.11990000E+01 0.30506700E+01 0.60516700E-02-0.49566300E-05    3
 0.28041600E-08-0.81933000E-12 0.66300100E+05 0.59540000E+01                   4
c2                      c   20   00   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.04135978E+02 0.06531618E-03 0.01837099E-05-0.05295085E-09 0.04712137E-13    2
 0.09967272E+06 0.07472923E+01 0.06996045E+02-0.07400601E-01 0.03234703E-04    3
 0.04802535E-07-0.03295917E-10 0.09897487E+06-0.13862268E+02                   4
c2o                     c   2o   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.48498100E+01 0.29475900E-02-0.10907300E-05 0.17926000E-09-0.11160000E-13    2
 0.32820600E+05-0.64500000E+00 0.33688500E+01 0.82418000E-02-0.87651500E-05    3
 0.55692600E-08-0.15400100E-11 0.33170800E+05 0.67130000E+01                   4
ch3hco                  c   2h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42557860E+01 0.13486030E-01-0.49183420E-05 0.82515040E-09-0.52694340E-13    2
-0.22167350E+05 0.29626580E+01 0.26969110E+01 0.12334280E-01 0.56746450E-05    3
-0.10870700E-07 0.37648250E-11-0.21403140E+05 0.12530480E+02                   4
ch3co                   c   2h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.51153110E+01 0.98613270E-02-0.39464200E-05 0.72974800E-09-0.50605210E-13    2
-0.35811130E+04-0.90078660E+00 0.63079430E+01-0.12387940E-01 0.58094930E-04    3
-0.63043300E-07 0.22737730E-10-0.29439700E+04-0.23500130E+01                   4
ch3co3    12/ 1/99 thermc   2h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1391.000    21
 1.12522498E+01 8.33652672E-03-2.89014530E-06 4.52781734E-10-2.64354456E-14    2
-2.60238584E+04-2.96370457E+01 3.60373432E+00 2.70080341E-02-2.08293438E-05    3
 8.50541104E-09-1.43846110E-12-2.34205171E+04 1.12014914E+01                   4
ch3co3h   12/ 1/99 thermc   2h   4o   3    0g   300.000  5000.000 1394.000    31
 1.37322713E+01 8.48685152E-03-2.97384001E-06 4.69349388E-10-2.75478312E-14    2
-4.41488006E+04-4.40518223E+01 2.57730860E+00 3.61100344E-02-2.93494631E-05    3
 1.19896814E-08-1.96202348E-12-4.04609764E+04 1.52535301E+01                   4
ch3co2     2/14/95 thermc   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1395.000    11
 8.54059736e+00 8.32951214e-03-2.84722010e-06 4.41927196e-10-2.56373394e-14    2
-2.97290678e+04-2.03883545e+01 2.42464726e+00 2.19706380e-02-1.68705546e-05    3
 6.24799508e-09-9.09516835e-13-2.72330150e+04 1.81405454e+01                   4
ch2hco                  c   2h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62296160E+01 0.82942530E-02-0.30009110E-05 0.53016450E-09-0.35879900E-13    2
-0.95927900E+03-0.66267480E+01 0.22223130E+01 0.18691380E-01-0.11548250E-04    3
 0.18284110E-08 0.82339070E-12 0.20216150E+03 0.14283700E+02                   4
ch2co                   c   2h   2o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.60388200E+01 0.58048400E-02-0.19209500E-05 0.27945000E-09-0.14590000E-13    2
-0.85834000E+04-0.76580000E+01 0.29749700E+01 0.12118710E-01-0.23450500E-05    3
-0.64666800E-08 0.39056500E-11-0.76326000E+04 0.86740000E+01                   4
hcco                    c   2h   1o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.67580700E+01 0.20004000E-02-0.20276000E-06-0.10411000E-09 0.19650000E-13    2
 0.19015100E+05-0.90710000E+01 0.50479700E+01 0.44534800E-02 0.22683000E-06    3
-0.14820900E-08 0.22507000E-12 0.19658900E+05 0.48200000E+00                   4
ch3co2     2/14/95 ThERMc   2h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1395.000    11
 8.54059736e+00 8.32951214E-03-2.84722010E-06 4.41927196E-10-2.56373394E-14    2
-2.97290678E+04-2.03883545E+01 1.37440768E+00 2.49115604E-02-1.74308894E-05    3
 6.24799508E-09-9.09516835E-13-2.72330150E+04 1.81405454E+01                   4
c2h5oh                  c   2h   6o   10   0G   300.00   5000.0   1000.00      1
 0.65624365E+01 0.15204222E-01-0.53896795E-05 0.86225011E-09-0.51289787E-13    2
-0.31525621E+05-0.94730202E+01 0.48586957E+01-0.37401726E-02 0.69555378E-04    3
-0.88654796E-07 0.35168835E-10-0.29996132E+05 0.48018545E+01                   4
c2h5o          mar96   c   2h   5o   1    G  0300.00   5000.00  1405.00      1
 8.31182392e 00 1.03426319e-02-3.39186089e-06 5.12212617e-10-2.91601713e-14    2
-6.13097954e 03-2.13985581e 01-2.71296378e-01 2.98839812e-02-1.97090548e-05    3
 6.37339893e-09-7.77965054e-13-3.16397196e 03 2.47706003e 01                   4
ch3choh         mar96   c   2h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1524.000    1
 7.95432747e 00 1.05008170e-02-3.50631590e-06 5.36174608e-10-3.07978459e-14    2
-8.62199768e 03-1.90411129e 01 2.10026806e 00 1.92626679e-02-5.17437436e-06    3
-1.96190582e-09 9.36397060e-13-6.12873036e 03 1.40909302e 01                   4
c2h5o2     7/27/98 thermc   2h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1386.000    21
 9.15255914e+00 1.24709284e-02-4.27100650e-06 6.63470012e-10-3.85024363e-14    2
-7.82759319e+03-1.99384891e+01 3.25121167e+00 2.36765869e-02-1.18477606e-05    3
 2.79401564e-09-2.41043601e-13-5.44533068e+03 1.27953147e+01                   4
c2h5o2h    7/27/98 thermc   2h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    31
 1.15361794e+01 1.26680904e-02-4.36302927e-06 6.80516196e-10-3.96092541e-14    2
-2.58990676e+04-3.37584606e+01 2.55448138e+00 3.13447282e-02-1.84312866e-05    3
 5.15917791e-09-5.28572992e-13-2.25353676e+04 1.53197322e+01                   4
c2h4o                   c   2h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59249200E+01 0.11120710E-01-0.37434100E-05 0.55414000E-09-0.29550000E-13    2
-0.93028000E+04-0.93790000E+01-0.24174000E+00 0.20761100E-01 0.21481200E-05    3
-0.16948160E-07 0.81075800E-11-0.71720000E+04 0.24432000E+02                   4
c2h4o2h    7/27/98 thermc   2h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.11476965e+01 1.04949968e-02-3.62326819e-06 5.66061229e-10-3.29857328e-14    2
-8.35606734e+02-2.87480538e+01 3.40977031e+00 2.65939711e-02-1.57408161e-05    3
 4.41132564e-09-4.49209001e-13 2.05874655e+03 1.35264941e+01                   4
ho2c2h4o2  2/28/ 9 Shengc   2h   5o   4    0    300.000  5000.000 1389.000    71
 1.78271039E+01 8.76828394E-03-3.15540892E-06 5.06841213E-10-3.01121708E-14    2
-1.96919472E+04-6.26509007E+01 5.81254906E-01 5.33651264E-02-4.78856204E-05    3
 2.10690708E-08-3.65784220E-12-1.41852079E+04 2.83584867E+01                   4
ho2ch2cho  2/28/ 9 Shengc   2h   4o   3    0    300.000  5000.000 1518.000    71
 1.55413835E+01 5.53187215E-03-2.02058210E-06 3.27757160E-10-1.96051476E-14    2
-3.53011552E+04-5.19191139E+01 1.32104706E+00 3.95035509E-02-3.18807555E-05    3
 1.16920644E-08-1.58142176E-12-3.06070328E+04 2.39043484E+01                   4
ch2cho2h   2/28/ 9 Shengc   2h   4o   2    0    300.000  5000.000 1313.000    71
 1.29997018E+01 7.04643154E-03-3.11537702E-06 5.71816837E-10-3.72252422E-14    2
-1.17951036E+04-4.35697054E+01-5.09003533E+00 5.33597546E-02-4.95761678E-05    3
 2.21353583E-08-3.88417588E-12-5.92854672E+03 5.21431058E+01                   4
c2h2oh                  c   2h   3N   0o   1G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.47233350E+01 0.96207300E-02-0.36158930E-05 0.64574520E-09-0.43829560E-13    2
 0.14488110E+05 0.29174630E+01 0.66247990E+01-0.92478740E-02 0.42942900E-04    3
-0.44577050E-07 0.15587310E-10 0.14680820E+05-0.34617090E+01                   4
```

```
hccoh                  c   2h   2o   10   0G   300.00   4000.00  1000.00      1
 7.32832432E+00 3.33641609E-03-3.02470511E-07-1.78110637E-10 3.24516787E-14    2
 7.59825781E+03-1.40121403E+01 3.89046532E+00 9.70107503E-03-3.11930933E-07    3
-5.53773250E-09 2.46573248E-12 8.70119043E+03 4.49187470E+00                   4
chocho                 c   2h   2o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.80213250E+01 0.75729310E-02-0.31166720E-05 0.58645500E-09-0.41132260E-13    2
-0.28750050E-05-0.16247820E+02 0.33600290E+01 0.12559770E-01 0.10569420E-04    3
-0.24503780E-07 0.11037460E-10-0.27087360E+05 0.97151500E+01                   4
choco                  c   2h   1o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.83591970E+01 0.44947090E-02-0.19879570E-05 0.38903890E-09-0.27935880E-13    2
-0.12406730E-05-0.16767200E+02 0.76697390E+01-0.12908030E-01 0.59528090E-04    3
-0.69600430E-07 0.26537680E-10-0.11337010E+05-0.86714600E+01                   4
c2h3o      7/29/ 8 LECoNc   2h   3o   1    0G   300.000  5000.000 1402.000    01
 7.19614156E+00 6.91729576E-03-2.26751545E-06 3.41999671E-10-1.94428148E-14    2
 4.43745124E+03-1.30382088E+01 1.92139180E+00 2.06514815E-02-1.62205965E-05    3
 6.85662731E-09-1.18602910E-12 6.12320514E+03 1.47811148E+01                   4
pc2h4oh    3/12/95 thermc   2h   5o   1    g  0300.00   5000.00  1391.00      1
 7.52241939e+00 1.10492715e-02-3.72576465e-06 5.72827397e-10-3.30061759e-14    2
-7.29333590e+03-1.24958732e+01 1.17714711e+00 2.48115685e-02-1.50299503e-05    3
 4.79006785e-09-6.40994211e-13-4.95369043e+03 2.20081586e+01                   4
o2c2h4oh   2/14/95 thermc   2h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1392.000    31
 9.22339915e 00 1.41346358e-02-4.75283025e-06 7.28795964e-10-4.18969629e-14    2
-2.35984031e 04-1.53847386e 01 3.58811609e 00 2.99414161e-02-2.35156549e-05    3
 1.12635525e-08-2.28663686e-12-2.17409435e 04 1.42166729e 01                   4
! Base C3
c3h8                   0c   3h   8          G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 .54638848E+01  .22160569E-01  -.77296281E-05 .12495476E-08 -.77377605E-13      2
-.15629374E+05 -.62309151E+01  -.31831896E+00 .34746405E-01 -.12885018E-04      3
-.35057037E-08  .30165358E-11  -.13851594E+05 .24514595E+02                     4
nc3h7      7/29/ 8 LECoNc   3h   7    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    01
 9.56126849E+00 1.38734820E-02-4.60227199E-06 7.24548394E-10-4.30884189E-14    2
 7.26509394E+03-2.65067472E+01-1.01686942E+00 3.94584104E-02-2.87426992E-05    3
 1.12906302E-08-1.84330666E-12 1.08704508E+04 3.00269057E+01                   4
ic3h7      7/29/ 8 LECoNc   3h   7    0    0G   300.000  5000.000 1672.000    01
 6.92806640E+00 1.81150194E-02-6.36444997E-06 1.01089141E-09-5.97141538E-14    2
 7.27878657E+03-1.22422027E+01 4.27330268E-01 2.77455867E-02-8.00320231E-06    3
-1.59250137E-09 8.55006422E-13 9.93578829E+03 2.44622019E+01                   4
c3h6       7/29/ 8 LECoNc   3h   6    0    0G   300.000  5000.000 2011.000    01
 7.37026919E+00 1.49257236E-02-5.19343204E-06 8.19736429E-10-4.82183580E-14    2
-1.37134802E+03-1.63663994E+01 1.74737267E-01 2.92385712E-02-1.43662857E-05    3
 2.72840194E-09-4.90818547E-14 1.22586003E+03 2.29598443E+01                   4
ac3h5      7/29/ 8 LECoNc   3h   5    0    0G   300.000  5000.000 1378.000    01
 9.75762472E+00 1.00615154E-02-3.40608453E-06 5.25696641E-10-3.03917313E-14    2
 1.48064656E+04-2.86136518E+01 9.73013817E-01 2.81818597E-02-1.62938809E-05    3
 3.96194325E-09-2.25704537E-13 1.80449676E+04 1.93302063E+01                   4
tc3h5                  c   3h   50   00   0G   300.00   4000.00  1000.00      1
 0.09101018E+02 0.07964167E-01-0.07884945E-05-0.04562036E-08 0.08529212E-12    2
 0.02670680E+06-0.02150559E+03 0.03385811E+02 0.14045337E-01 0.03204127E-04    3
-0.03824120E-07-0.09053742E-11 0.02909066E+06 0.11266487E+02                   4
sc3h5                  c   3h   50   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58477490E+01 0.13663110E-01-0.49967060E-05 0.88456350E-09-0.59866940E-13    2
 0.28598090E+05-0.57165180E+01 0.24096770E+01 0.15250660E-01 0.10397290E-04    3
-0.22191280E-07 0.94724950E-11 0.29973540E+05 0.14057150E+02                   4
pc3h4                  c   3h   40   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.60892310E+01 0.11866400E-01-0.46685320E-05 0.85588780E-09-0.59055250E-13    2
 0.19466620E+05-0.93572010E+01 0.61101990E+01-0.67416390E-02 0.53216180E-04    3
-0.60988720E-07 0.22487930E-10 0.20406530E+05-0.48582320E+01                   4
ac3h4                  c   3h   40   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.63218080E+01 0.11755130E-01-0.46546710E-05 0.85713520E-09-0.59327540E-13    2
 0.19990410E+05-0.11405800E+02 0.45453210E+01 0.45320690E-03 0.41642470E-04    3
-0.52550230E-07 0.20129320E-10 0.21299590E+05 0.17743890E+01                   4
```

```
c3h3                   c   3h   30   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.73698450E+01 0.77854710E-02-0.30216960E-05 0.55099410E-09-0.37929260E-13    2
 0.38891950E+05-0.14110520E+02 0.56629250E+01 0.43052760E-02 0.18210260E-04    3
-0.25694770E-07 0.10163000E-10 0.39782900E+05-0.32569600E+01                   4
c3h2                   c   3h   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.06530853E+02 0.05870316E-01-0.01720776E-04 0.02127498E-08-0.08291910E-13    2
 0.05115213E+06-0.11227278E+02 0.02691077E+02 0.14803664E-01-0.03250551E-04    3
-0.08644363E-07 0.05284877E-10 0.05219072E+06 0.08757391E+02                   4
nc3h7o     4/ 7/97 ThERMc   3h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    21
 1.10130308E+01 1.58110271E-02-5.38743215E-06 8.34264825E-10-4.83147349E-14    2
-1.01528968E+04-3.27511689E+01 2.89706514E-01 3.93075560E-02-2.48069355E-05    3
 8.07083573E-09-1.07998290E-12-6.24474269E+03 2.54387810E+01                   4
nc3h7oh                c   3h   8o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.78695178E+01 0.22170236E-01-0.76477927E-05 0.12332934E-08-0.76598667E-13    2
-0.36669754E+05-0.15247448E+02 0.13337798E+00 0.40273454E-01-0.14728696E-04    3
-0.80114964E-08 0.58863921E-11-0.34506324E+05 0.25219995E+02                   4
nc3h7o2                c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13502689E+02 0.13771964E-01-0.35621306E-05 0.46638027E-09-0.25058699E-13    2
-0.10900663E+05-0.42337200E+02 0.34593359E+00 0.47804203E-01-0.34433560E-04    3
 0.11472139E-07-0.10343456E-11-0.70191328E+04 0.26533663E+02                   4
nc3h7o2h               c   3h   8o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11336926E+02 0.20394048E-01-0.67093242E-05 0.10477861E-08-0.63728191E-13    2
-0.30503672E+05-0.29776390E+02 0.10277675E+01 0.49290877E-01-0.32700023E-04    3
 0.73782482E-08 0.10003533E-11-0.27774795E+05 0.23159100E+02                   4
ic3h7o     4/ 7/97 ThERMc   3h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.14592753E+01 1.55902812E-02-5.34443227E-06 8.30858106E-10-4.82455289E-14    2
-1.24638531E+04-3.62203624E+01-1.00369576E-01 4.31118928E-02-3.10631817E-05    3
 1.20668364E-08-1.97214967E-12-8.44902998E+03 2.57650010E+01                   4
ic3h7o2                c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14202599E+02 0.13157809E-01-0.33661620E-05 0.43802198E-09-0.23482254E-13    2
-0.13916771E+05-0.47463253E+02-0.38399315E+00 0.53882204E-01-0.45532583E-04    3
 0.19618367E-07-0.31824515E-11-0.98001953E+04 0.28052458E+02                   4
ic3h7o2h   7/19/ 0 ThERMc   3h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 1.57046391E+01 1.65924516E-02-5.77250934E-06 9.06453070E-10-5.30084111E-14    2
-3.23268564E+04-5.71735156E+01 5.19265570E-01 5.32111228E-02-4.05156892E-05    3
 1.63346713E-08-2.73751233E-12-2.71048486E+04 2.40815065E+01                   4
c3h6ooh1-2             c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13649559E+02 0.12750814E-01-0.31189277E-05 0.39289025E-09-0.20614268E-13    2
-0.48945811E+04-0.39010017E+02 0.15149921E+01 0.48824649E-01-0.45656896E-04    3
 0.24564915E-07-0.55713593E-11-0.15504653E+04 0.23338097E+02                   4
c3h6ooh1-3             c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14188224E+02 0.12368476E-01-0.30191270E-05 0.38157991E-09-0.20166079E-13    2
-0.39905498E+04-0.42191696E+02 0.64384925E+00 0.54055225E-01-0.54415486E-04    3
 0.31187664E-07-0.75596803E-11-0.35104904E+03 0.26997149E+02                   4
c3h6ooh2-1             c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14896511E+02 0.11743539E-01-0.28182487E-05 0.35167325E-09-0.18422740E-13    2
-0.73632920E+04-0.46675972E+02-0.70671819E-01 0.60035869E-01-0.65301727E-04    3
 0.39138424E-07-0.96432836E-11-0.34861638E+04 0.29140375E+02                   4
c3h6ooh1-1             c   3h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13773190E+02 0.12478714E-01-0.30193419E-05 0.37854145E-09-0.19864939E-13    2
-0.67642393E+04-0.39605103E+02 0.39244589E+00 0.56736656E-01-0.63722880E-04    3
 0.41441332E-07-0.11236257E-10-0.33003713E+04 0.28036133E+02                   4
c3h6ooh1-2o2           c   3h   7o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18916473E+02 0.12912722E-01-0.31142890E-05 0.38873985E-09-0.20298040E-13    2
-0.25199982E+05-0.64061310E+02 0.14959549E+01 0.63019961E-01-0.55043904E-04    3
 0.22621872E-07-0.30201917E-11-0.20481516E+05 0.25471867E+02                   4
c3h6ooh1-3o2           c   3h   7o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18175089E+02 0.13586381E-01-0.33381091E-05 0.42327411E-09-0.22383283E-13    2
-0.22435437E+05-0.58695740E+02 0.22698126E+01 0.56646202E-01-0.43273030E-04    3
 0.13861366E-07-0.67737602E-12-0.17976955E+05 0.23766033E+02                   4
c3h6ooh2-1o2           c   3h   7o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.18915003E+02 0.12915267E-01-0.31156469E-05 0.38901213E-09-0.20316124E-13    2
-0.25199189E+05-0.64053436E+02 0.13388267E+01 0.64106293E-01-0.57643643E-04    3
 0.25205956E-07-0.39308422E-11-0.20464656E+05 0.26136774E+02                   4
c3h6ooh1-1o2           c   3h   7o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18411318E+02 0.12571108E-01-0.29156811E-05 0.35375863E-09-0.18130491E-13    2
-0.26609484E+05-0.62735687E+02 0.91786242E+00 0.56343596E-01-0.30807794E-04    3
-0.52401790E-08 0.72193970E-11-0.21753922E+05 0.28333649E+02                   4
c3ket12    7/19/ 0 ThERMc   3h   6o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.70756225E+01 1.31013491E-02-4.61949408E-06 7.31991329E-10-4.30788679E-14    2
-4.17008637E+04-5.95778952E+01 1.10507238E+00 5.27396706E-02-4.31805774E-05    3
 1.81618292E-08-3.10535568E-12-3.63627536E+04 2.54111636E+01                   4
c3ket13    7/19/ 0 ThERMc   3h   6o   3    0G   300.000  5000.000 1379.000    41
 1.58927479E+01 1.40990923E-02-4.96118851E-06 7.84992198E-10-4.61488928E-14    2
-3.93774829E+04-5.26049341E+01 3.55241022E+00 4.18720270E-02-2.94550370E-05    3
 1.09982900E-08-1.75045977E-12-3.48902671E+04 1.42082894E+01                   4
c3ket21    7/19/ 0 ThERMc   3h   6o   3    0G   300.000  5000.000 1371.000    41
 1.56377776e+01 1.44059342e-02-5.08808082e-06 8.07076119e-10-4.75295650e-14    2
-4.30657975e+04-5.13105869e+01 4.55686367e+00 3.57076837e-02-1.94712054e-05    3
 4.70695431e-09-3.69753807e-13-3.86710975e+04 9.97761694e+00                   4
c3h6o                  c   3h   6o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71031427E+01 0.18753586E-01-0.67436472E-05 0.11200114E-08-0.71012281E-13    2
-0.15019154E+05-0.13339043E+02 0.74423306E-01 0.35190679E-01-0.25911300E-04    3
 0.17298602E-07-0.65269183E-11-0.12573230E+05 0.24581474E+02                   4
c3h6o1-3   1/22/95 ThERMc   3h   6o   1    0G   300.000  5000.000 2035.000    41
 1.02363953E+01 1.50514705E-02-5.63636534E-06 9.32463455E-10-5.66102441E-14    2
-1.46212029E+04-3.36724732E+01-2.75717996E+00 4.26371602E-02-2.56831231E-05    3
 6.62981208E-09-5.31193325E-13-1.00990375E+04 3.67181804E+01                   4
c3h5o                  c   3h   5o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.69495180E+01 0.16078900E-01-0.59846810E-05 0.10683520E-08-0.72629020E-13    2
 0.77492990E+04-0.94650390E+01 0.30699180E+01 0.15521440E-01 0.18818300E-04    3
-0.33019540E-07 0.13649340E-10 0.94175490E+04 0.13422390E+02                   4
c3h4oh     7/29/ 8 LECoNc   3h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1412.000    21
 3.45190356E+01-1.01781489E-02 5.02260522E-06-9.24128411E-10 5.13679402E-14    2
-8.26014425E+03-1.67166292E+02-5.15428271E+01 2.82867045E-01-3.72574445E-04    3
 2.12594647E-07-4.42197574E-11 1.29747235E+04 2.63287027E+02                   4
c3h4o2h    3/ 8/ 7 ThERMc   3h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    21
 1.28560256E+01 1.21730433E-02-4.23707918E-06 6.65544920E-10-3.89278703E-14    2
 1.57255303E+04-3.75208282E+01 3.91090755E+00 3.11536975E-02-1.94249346E-05    3
 6.18343396E-09-8.18424355E-13 1.90786161E+04 1.12924619E+01                   4
c3h4o      7/29/ 8 LECoNc   3h   4o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    01
 1.00706541E+01 9.62546535E-03-3.22060854E-06 4.93284520E-10-2.83701133E-14    2
-1.27635114E+04-2.89037669E+01 5.23552792E-01 3.16317891E-02-2.20953153E-05    3
 7.61912822E-09-1.02252256E-12-9.47399642E+03 2.23829839E+01                   4
c3h3o                  c   3h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13887620E+02 0.29359820E-01-0.10987710E-04 0.19709660E-08-0.13450330E-12    2
 0.12987410E+05-0.42751150E+02-0.59639260E+00 0.62097700E-01-0.26277400E-04    3
-0.10464540E-07 0.93368350E-11 0.17413660E+05 0.33985150E+02                   4
c3h5o2h                c   3h   6o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10591680E+02 0.16171450E-01-0.52988012E-05 0.82363749E-09-0.49852836E-13    2
-0.11490892E+05-0.24723507E+02 0.93321240E+00 0.43424893E-01-0.30121077E-04    3
 0.71619630E-08 0.82890433E-12-0.89453877E+04 0.24820049E+02                   4
c3h5e1q2               c   3h   6o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10909508E+02 0.16794676E-01-0.57275392E-05 0.91581626E-09-0.56526222E-13    2
-0.12332066E+05-0.27471462E+02 0.51672029E+00 0.51106941E-01-0.47172194E-04    3
 0.22034492E-07-0.36731447E-11-0.98368721E+04 0.24594032E+02                   4
c3h5oq                 c   3h   6o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16870092E+02 0.68185821E-01-0.24252884E-04 0.39975974E-08-0.25215041E-12    2
-0.39237465E+05-0.53114212E+02-0.18994358E+00 0.10673244E+00-0.35085766E-04    3
-0.21366752E-07 0.14464667E-10-0.34442055E+05 0.36377739E+02                   4
ethco                  0c   3h   6o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
  .70107722E+01  .18013448E-01 -.62295217E-05  .10005839E-08 -.61661722E-13    2
```

```
 -.25691457E+05 -.95488281E+01  .28277023E+01  .25430365E-01 -.61913220E-05    3
 -.50245177E-08  .26785609E-11 -.24271348E+05  .13234089E+02                   4
c2h5co      6/26/95 thermc   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1373.000    21
 9.87881997e+00 1.17515676e-02-4.00614923e-06 6.20850617e-10-3.59835225e-14    2
-8.47292283e+03-2.49235196e+01 2.93313946e+00 2.47427911e-02-1.21222003e-05    3
 2.34701048e-09-5.26843338e-14-5.69663063e+03 1.35958355e+01                   4
c2h5co3                c   3h   5o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.84316063E+01 0.47750685E-01-0.20184867E-04 0.37543364E-08-0.25770339E-12    2
-0.22789600E+05 0.82914917E+02-0.22556863E+01 0.57826187E-01-0.52041793E-04    3
 0.20459542E-07-0.14303576E-11-0.27326064E+05 0.40830891E+02                   4
c2h5co3h               c   3h   6o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11056312E+02 0.56293424E-01-0.25608328E-04 0.50172533E-08-0.35755098E-12    2
-0.39727973E+05 0.98463287E+02-0.10344489E+01 0.54687813E-01-0.43102813E-04    3
 0.12590641E-07 0.10060073E-11-0.45281594E+05 0.36722210E+02                   4
c2h5co2                c   3h   5o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.76761365E+01 0.42290393E-01-0.17517008E-04 0.32117369E-08-0.21821233E-12    2
-0.23297082E+05 0.74442062E+02-0.58656538E+00 0.45167688E-01-0.36217069E-04    3
 0.10748638E-07 0.91656739E-12-0.27703131E+05 0.29145782E+02                   4
aceton   BURCAT        0c   3h   6o   1    G  0200.00   6000.00  1000.00      1
 7.29796974E+00 1.75656913E-02-6.31678065E-06 1.02025553E-09-6.10903592E-14    2
-2.95368927E+04-1.27591704E+01 5.55638920E+00-2.83863547E-03 7.05722951E-05    3
-8.78130984E-08 3.40290951E-11-2.78325393E+04 2.31960221E+00-2.58360384E+04    4
acrol      7/29/ 8 LECoNc   3h   4o   1    0G   300.000  5000.000 1480.000    01
 8.97743713E+00 1.08066787E-02-3.68270401E-06 5.71010322E-10-3.31194545E-14    2
-1.34748543E+04-2.11176946E+01 3.60685570E+00 1.54070098E-02 1.95396877E-06    3
-6.66660144E-09 1.98409866E-12-1.08391832E+04 1.05060530E+01                   4
c2h3co     7/29/ 8 LECoNc   3h   3o   1    0G   300.000  5000.000 1547.000    01
 1.59224942E+01 3.86944080E-03-1.68450540E-06 3.05605100E-10-1.97302624E-14    2
-3.91582842E+02-6.69822771E+01 3.55476414E-01 3.30029310E-03 4.16516285E-05    3
-3.78797376E-08 9.42743384E-12 8.82568852E+03 2.99647147E+01                   4
ch2coch3   Burcat A10/04c  3.h  5.o  1.   0.G    200.000  6000.000 1000.      1
 7.54410697E+00 1.43443222E-02-5.08381081E-06 8.13200521E-10-4.83673315E-14    2
-7.48672286E+03-1.14792587E+01 4.70187196E+00 5.51653762E-03 4.27505858E-05    3
-5.94680816E-08 2.40685378E-11-5.92845491E+03 7.12932590E+00-4.00857547E+03    4
c3h5oh                 c   3h   6o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
c3h6oh     4/24/92 ThERMc   3h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1403.000    31
 1.09340809E+01 1.49384611E-02-4.97490474E-06 7.58435125E-10-4.34420191E-14    2
-1.15876725E+04-2.89343754E+01 1.65867207E-01 4.13141037E-02-2.99664397E-05    3
 1.16234591E-08-1.86270510E-12-7.97925983E+03 2.84481654E+01                   4
o2c3h6oh   4/24/92 ThERMc   3h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1380.000    41
 1.55655181E+01 1.68822736E-02-5.91144639E-06 9.32274430E-10-5.46815496E-14    2
-2.95301139e+04-5.17312137e+01 2.20217327E+00 4.59913087E-02-3.03766163E-05    3
 1.05366009E-08-1.55928684E-12-2.45762626E+04 2.09594636E+01                   4
ch3chco                c   3h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.63257427E+01 0.65247067E-02-0.12662762E-05 0.13370773E-09-0.62057755E-14    2
-0.36616558E+04-0.21445749E+02 0.98070252E+00 0.16218642E-01-0.58109285E-05    3
 0.59742038E-10 0.26217044E-12-0.16838831E+04 0.80124340E+01                   4
ch2ch2hco  6/26/95 ThERMc   3h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1371.000    21
 9.97669730e+00 1.15899378e-02-3.93593247E-06 6.08601507E-10-3.52246874E-14    2
-2.41115816E+03-2.36014420E+01 2.95202753E+00 2.48297051E-02-1.23487153E-05    3
 2.49449869e-09-8.44820689E-14 3.85181944E+02 1.53181388E+01                   4
o2c2h4hco              c   3h   5o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59873166E+01 0.23788797E-01-0.82112338E-05 0.13246599E-08-0.82290735E-13    2
-0.17405863E+05 0.48074760E+01 0.18589790E+01 0.45797229E-01-0.38392540E-04    3
 0.15173494E-07-0.16430635E-11-0.17371359E+05 0.22181156E+02                   4
qch2chhco              c   3h   5o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.65630107E+01 0.22864575E-01-0.77858613E-05 0.12445959E-08-0.76857201E-13    2
-0.14836938E+05 0.32925720E+01 0.23097246E+01 0.50628807E-01-0.54614058E-04    3
```

```
 0.31712943E-07-0.72313535E-11-0.15042559E+05 0.19955605E+02                4
qqjch2chhco              c   3h   5o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.88524780E+01 0.27320053E-01-0.96576459E-05 0.15843693E-08-0.99575140E-13   2
-0.21583143E+05-0.29813080E+01 0.20869548E+01 0.62089298E-01-0.55453151E-04   3
 0.20841107E-07-0.15813198E-11-0.21454908E+05 0.25833302E+02                4
ho2c2h4co  11/13/07      c   3h   5o   3     0G   300.000  5000.000 1000.000   31
 0.61841831E+01 0.22389354E-01-0.74256582E-05 0.11646007E-08-0.70949811E-13   2
-0.17206695E+05 0.73449314E+01 0.35030098E+01 0.40761109E-01-0.35640427E-04   3
 0.16218964E-07-0.26064778E-11-0.17562961E+05 0.17165771E+02                4
qch2ch2co3 11/13/07      c   3h   5o   5     0G   300.000  5000.000 1000.000   31
-0.50781608E+01 0.49313385E-01-0.20429919E-04 0.37459174E-08-0.25448892E-12   2
-0.33732953E+05 0.73446014E+02-0.39694145E+00 0.67081004E-01-0.61753301E-04   3
 0.23583052E-07-0.12862078E-11-0.38276461E+05 0.37648914E+02                4
ho2c2h4hco  02/02/09     c   3h   6o   3     0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.39300311E+01 0.30475805E-01-0.11961065E-04 0.21116726E-08-0.13968816E-12   2
-0.34431125E+05 0.17605156E+02 0.30166800E+01 0.43097474E-01-0.30498470E-04   3
 0.83356602E-08 0.43335181E-12-0.35320078E+05 0.18343475E+02                4
oc2h4hco   02/02/09     c   3h   5o   2     0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37177391E+01 0.23471154E-01-0.81770404E-05 0.13273875E-08-0.82795478E-13   2
-0.16602336E+05 0.13593075E+02 0.47419909E+00 0.41671030E-01-0.34385801E-04   3
 0.14495274E-07-0.20121441E-11-0.16628582E+05 0.26996202E+02                4
ch3cocho   7/ 6/ 7 ThERMc   3h   4o   2    0G   300.000  5000.000 1373.000   21
 1.18377936E+01 1.06832643E-02-3.76864788E-06 5.97374721E-10-3.51655013E-14   2
-3.80189846E+04-3.43005438E+01 1.97192949E+00 3.01085469E-02-1.67791836E-05   3
 3.73805387E-09-1.49790837E-13-3.42361657E+04 1.99624294E+01                4
ch3coco    7/ 6/ 7 ThERMc   3h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1378.000   21
 1.12735441E+01 8.53005972E-03-3.00584312E-06 4.76106491E-10-2.80119089E-14   2
-2.18589653E+04-3.04547106E+01 3.00961286E+00 2.63548623E-02-1.73416768E-05   3
 5.60529311E-09-7.20790918E-13-1.88260803E+04 1.44793749E+01                4
ch2cohco   7/11/ 7 ThERMc   3h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000   11
 1.25716146E+01 7.89354143E-03-2.79644885E-06 4.44564212E-10-2.62241891E-14   2
-1.66392496E+04-3.79295242E+01 1.83606260E+00 3.34114474E-02-2.59376700E-05   3
 9.97502460E-09-1.53109363E-12-1.29848450E+04 1.95226824E+01                4
hcoch2hco  7/ 6/ 7 ThERGc   3h   4o   2    0G   300.000  5000.000 2041.000   31
 1.01665173E+01 1.26554663E-02-4.72118749E-06 7.79086094E-10-4.72151798E-14   2
-3.85694777E+04-2.39205149E+01 1.05479724E+00 3.10169903E-02-1.69152633E-05   3
 3.63174198E-09-1.52155933E-13-3.52900612E+04 2.58148090E+01                4
hcoch2co   7/ 6/ 7 ThERGc   3h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1375.000   31
 1.03839875E+01 8.95653335E-03-3.17495041E-06 5.04859934E-10-2.97835672E-14   2
-2.07847430E+04-2.26918341E+01 1.48700499E+00 2.83963833E-02-1.93510395E-05   3
 6.68152666E-09-9.54954634E-13-1.75210985E+04 2.56357273E+01                4
ch3coch2o2  2/14/95      c   3h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1379.00    31
 1.27690342e+01 1.42554828e-02-4.92821461e-06 7.70448921e-10-4.49110534e-14   2
-2.34798669e+04-3.27155799e+01 5.95535468e+00 2.70255205e-02-1.37385031e-05   3
 3.53735851e-09-4.03922557e-13-2.06679464e+04 5.21436049e+00                4
ch3coch2o  4/ 3/ 0 thermc   3h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1370.000   21
 1.14637586e+01 1.32124342e-02-4.56580495e-06 7.13897538e-10-4.16281047e-14   2
-2.23833017e+04-3.15127868e+01 3.72927689e+00 2.63943697e-02-1.09796486e-05   3
 8.58185303e-10 3.39474590e-13-1.91551565e+04 1.18505335e+01                4
ch3coch2o2h 2/14/95      c   3h   6o   3    0g   300.000  5000.000 1381.00    41
 1.52372810e+01 1.44114651e-02-5.01290009e-06 7.87071229e-10-4.60225784e-14   2
-4.27564444e+04-4.77383784e+01 4.94789761e+00 3.60474432e-02-2.21719933e-05   3
 6.98296874e-09-9.21269260e-13-3.88687178e+04 8.49926130e+00                4
propynal   3/ 8/ 7 ThERMc   3h   2o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000   11
 1.13834900E+01 3.86539656E-03-1.43543557E-06 2.33555277E-10-1.38525734E-14   2
-2.74224066E+03-4.61311767E+01 2.04975314E+00 2.95648515E-02-2.89148802E-05   3
 1.36273409E-08-2.49643945E-12 8.10578949E+01 2.56858501E+00                4
c2hco      3/ 8/ 7     c   3h   1o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000   01
 1.01783857E+01 3.04124871E-03-1.10131295E-06 1.77631920E-10-1.05836052E-14   2
 1.58902893E+04-3.92188228E+01 2.74957395E+00 2.31011059E-02-2.21190313E-05   3
 1.02312072E-08-1.84461815E-12 1.81735009E+04-3.23514715E-01                4
```

```
! Base C4
ic4h9                    c   4h   90   00   0G   300.00   5000.000  1000.00     1
 0.90892484E+01 0.24142553E-01-0.90926191E-05 0.15645149E-08-0.10112622E-12   2
 0.37805772E+04-0.22806785E+02-0.17234362E+01 0.56100048E-01-0.50882003E-04   3
 0.32521537E-07-0.10413575E-10 0.68675433E+04 0.33080896E+02                4
tc4h9                    c   4h   90   00   0G   300.00   5000.000  1000.00     1
 0.90709925E+01 0.22472441E-01-0.75462058E-05 0.11124330E-08-0.58946771E-13   2
 0.82343457E+03-0.23632431E+02 0.31227112E+01 0.25226224E-01 0.11214444E-04   3
-0.22687910E-07 0.81753137E-11 0.34445190E+04 0.11197623E+02                4
ic4h8                    c   4h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.44609470E+01 0.29611487E-01-0.13077129E-04 0.26571934E-08-0.20134713E-12   2
-0.50066758E+04 0.10671549E+01 0.26471405E+01 0.25902957E-01 0.81985354E-05   3
-0.22193259E-07 0.88958580E-11-0.40373069E+04 0.12676388E+02                4
ic4h7                    c   4h   70   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.91749680E+01 0.18672980E-01-0.67359360E-05 0.11884610E-08-0.80369600E-13   2
 0.10254610E+05-0.24345480E+02-0.44200080E+00 0.45216870E-01-0.32260950E-04   3
 0.97245970E-08-0.18413410E-13 0.12961550E+05 0.25443950E+02                4
c4h4o                    c   4h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.95622100E+01 0.18357260E-01-0.73843870E-05 0.13726610E-08-0.95581110E-13   2
-0.27256590E+04-0.28622530E+02 0.11296920E-01 0.28646280E-01 0.19574870E-04   3
-0.48074430E-07 0.21654150E-10 0.70615460E+03 0.24629120E+02                4
c3h4hco    3/ 8/ 7 ThERMc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000   21
 1.29057409E+01 1.21125634E-02-4.21317680E-06 6.61578596E-10-3.86900053E-14   2
 6.22460269E+03-4.15460021E+01-1.32463902E-01 4.48860123E-02-3.65566047E-05   3
 1.54811974E-08-2.67115426E-12 1.05424224E+04 2.76926684E+01                4
c3h3hco                  c   4h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40837727E+01 0.27734047E-01-0.13153832E-04 0.26552880E-08-0.19342094E-12   2
 0.59737588E+04 0.66168709E+01 0.11482457E+01 0.30637158E-01-0.11443767E-04   3
 0.19931119E-09 0.48908642E-12 0.73652012E+04 0.23784662E+02                4
c3h3co                   c   4h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54697051E+01 0.20590097E-01-0.83108216E-05 0.14963151E-08-0.10035834E-12   2
 0.23223531E+05-0.11719551E+01 0.23043721E+01 0.16522696E-01 0.14482298E-04   3
-0.21086697E-07 0.68923625E-11 0.25072066E+05 0.19143721E+02                4
c4h10                    c   4h  10o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18290246E+01 0.37759554E-01-0.14565891E-04 0.25407361E-08-0.16666360E-12   2
-0.18126377E+05 0.14366367E+02-0.46007365E-01 0.43097489E-01-0.10378325E-04   3
-0.12544056E-07 0.72553361E-11-0.18029369E+05 0.23059675E+02                4
pc4h9   BURCAT    T 6/04c   4h   9    0    0g   200.000  6000.000 1000.00     1
 8.97401527E+00 2.39704154E-02-8.48703645E-06 1.35644127E-09-8.06234913E-14   2
 5.19161526E+03-2.31075609E+01 4.73737837E+00 9.69051565E-03 6.63846383E-05   3
-9.24799302E-08 3.74006099E-11 7.57382332E+03 4.91063455E+00 9.83838903E+03   4
sc4h9   BURCAT    T 6/04c   4h   9    0    0g   200.000  6000.000 1000.00     1
 7.72287211E+00 2.43427284E-02-8.65476475E-06 1.38712529E-09-8.26084187E-14   2
 4.15004489E+03-1.43949625E+01 5.42089393E+00-9.12146870E-04 8.84998581E-05   3
-1.12115531E-07 4.38222782E-11 6.28927311E+03 5.04210029E+00 8.44598852E+03   4
c4h8       Burcat        c   4h   8o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20535841E+01 0.34350507E-01-0.15883197E-04 0.33089662E-08-0.25361045E-12   2
-0.21397231E+04 0.15556360E+02 0.11811380E+01 0.30853380E-01 0.50865247E-05   3
-0.24654888E-07 0.11110193E-10-0.17904004E+04 0.21075639E+02-0.06494670E+03   4
t2c4h8                   c   4h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82797676E+00 0.35864539E-01-0.16634498E-04 0.34732759E-08-0.26657398E-12   2
-0.30521033E+04 0.21342545E+02 0.12594252E+01 0.27808424E-01 0.87013932E-05   3
-0.24402205E-07 0.98977710E-11-0.29647742E+04 0.20501129E+02                4
c2c4h8                   c   4h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78306820E+01 0.22235800E-01-0.81724150E-05 0.14497050E-08-0.98197430E-13   2
-0.57222290E+04-0.17109110E+02 0.28161200E+01 0.21483640E-01 0.23849340E-04   3
-0.42454030E-07 0.17550510E-10-0.35593090E+04 0.12493960E+02                4
Ac4h7-1    7/10/ 7 ThERGc   4h   7o   0    0G   300.000  5000.000 1000.000   21
 0.10585844E+02 0.14295458E-01-0.38427370E-05 0.52097876E-09-0.28860645E-13   2
 0.24724699E+05-0.29515842E+02-0.48956922E+00 0.44776533E-01-0.38022383E-04   3
 0.20486294E-07-0.52131485E-11 0.27998318E+05 0.28240118E+02                4
```

```
Cc4h7-1                  c   4h   70   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.5521420E+01  0.2683684E-01 -0.1286430E-04  0.3088640E-08 -0.3030856E-12    2
 0.1198044E+05 -0.4495640E+01 -0.1080514E+01  0.4638686E-01 -0.3464697E-04    3
 0.1401374E-07 -0.2395040E-11  0.1375538E+05  0.2933150E+02                  4
Dc4h7-1                  c   4h   7o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11100403E+02 0.13815344E-01-0.36729841E-05 0.49313426E-09-0.27090695E-13   2
 0.19567062E+05-0.31800911E+02-0.11401347E+01 0.50582599E-01-0.49579528E-04   3
 0.29734473E-07-0.78816146E-11 0.22986725E+05 0.31156263E+02                4
c4h6                     c   4h   60   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.98438620E+01 0.15445170E-01-0.57172000E-05 0.10145160E-08-0.68655930E-13   2
 0.90772280E+04-0.28003430E+02 0.11107870E+02-0.63027940E-02 0.53619200E-04   3
-0.59145190E-07 0.21238630E-10 0.96868770E+04-0.29928690E+02                4
butyne                   c   4h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.80387070E+01 0.16361490E-01-0.51950590E-05 0.87261840E-09-0.57617240E-13   2
 0.16274420E+05-0.16772050E+02-0.57984030E+00 0.46665740E-01-0.48803730E-04   3
 0.31088930E-07-0.83509690E-11 0.18381660E+05 0.26264080E+02                4
butyn2                   c   4h   6    0    0G   300.000  5000.000              1
 0.80465832E+01 0.16485251E-01-0.55222272E-05 0.81235929E-09-0.42950784E-13   2
 0.13701305E+05-0.18017740E+02 0.31971083E+01 0.20255916E-01 0.65101922E-05   3
-0.16584423E-07 0.64002822E-11 0.15715203E+05 0.99088230E+01 0.17597979E+05   4
meall                    c   4h   60   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
  0.1781557E+02 -0.4257502E-02  0.1051185E-04 -0.4473844E-08  0.5848138E-12    2
  0.1267342E+05 -0.6983978E+02  0.1023467E+01  0.3495919E-01 -0.2200905E-04    3
  0.6942272E-08 -0.7879187E-12  0.1811799E+05  0.1973750E+02                  4
ic4h5                    c   4h   5    0    0G   300.00   5000.0     1000.0   01
 0.90956680E+01 0.14777760E-01-0.60020560E-05 0.11199920E-08-0.78116340E-13   2
 0.33138790E+05-0.19989900E+02 0.76222620E+01-0.78198420E-02 0.74335610E-04   3
-0.88638960E-07 0.33414190E-10 0.34873060E+05-0.58366290E+01                4
nc4h5                    c   4h   5    0    0G   300.0    5000.0   1000.00   01
 0.10014330E+02 0.14816500E-01-0.62390490E-05 0.11873550E-08-0.83812640E-13   2
 0.38641150E+05-0.26894940E+02 0.86183830E+01-0.18673580E-01 0.10944920E-03   3
-0.12786270E-06 0.48163990E-10 0.40832320E+05-0.10651440E+02                4
c4h4                     c   4h   40   00   0G   300.00   4000.00  1000.00     1
 0.10697773E+02 0.06982014E-01-0.06567747E-05-0.03884517E-08 0.07200946E-12   2
 0.03034803E+06-0.03128430E+03 0.03233893E+02 0.01865634E+00 0.12703205E-05   3
-0.09410096E-07 0.02956110E-10 0.03301097E+06 0.09922676E+02                4
nc4h3                    c   4h   30   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.91143560E+01 0.95471120E-02-0.38843590E-05 0.72623270E-09-0.50737070E-13   2
 0.61621520E+05-0.21296650E+02 0.56986800E+01 0.60107180E-02 0.28706380E-04   3
-0.41907200E-07 0.16944030E-10 0.63201220E+05-0.49851380E+00                4
ic4h3                    c   4h   30   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.97570450E+01 0.88991060E-02-0.36321540E-05 0.67966640E-09-0.47498080E-13   2
 0.52220940E+05-0.22567330E+02 0.92063570E+01-0.68412580E-02 0.49426770E-04   3
-0.57756540E-07 0.21620850E-10 0.53230880E+05-0.15490760E+02                4
c4h2                     c   4h   20   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.09031407E+02 0.06047252E-01-0.01948788E-04 0.02754863E-08-0.13856080E-13   2
 0.05294735E+06-0.02385067E+03 0.04005191E+02 0.01981000E+00-0.09865877E-04   3
-0.06635158E-07 0.06077413E-10 0.05424065E+06 0.01845736E+02                4
c4h9qjA                  c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15595833E+02 0.19481253E-01-0.54285274E-05 0.75312029E-09-0.42252778E-13   2
-0.14424153E+05-0.51581955E+02 0.24988347E+00 0.58799535E-01-0.39250695E-04   3
 0.10553014E-07 0.14231263E-13-0.99245605E+04 0.28736156E+02                4
c4h9qjB                  c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16361448E+02 0.18758347E-01-0.51723669E-05 0.71152551E-09-0.39656128E-13   2
-0.17197613E+05-0.56386620E+02-0.58159930E+00 0.65555476E-01-0.51889827E-04   3
 0.20125093E-07-0.25961908E-11-0.12422730E+05 0.31381353E+02                4
c4h8rAqA                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16051825E+02 0.17835706E-01-0.46704640E-05 0.61662292E-09-0.33299782E-13   2
-0.10357569E+05-0.49870140E+02 0.38599816E+00 0.67110069E-01-0.67045628E-04   3
 0.39030780E-07-0.96601217E-11-0.62153784E+04 0.29860762E+02                4
c4h8rBqA                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.16051500E+02 0.17864266E-01-0.46945179E-05 0.62312139E-09-0.33868511E-13   2
-0.84911982E+04-0.49861786E+02 0.41746065E+00 0.66929147E-01-0.66410845E-04   3
 0.38230098E-07-0.93350154E-11-0.43590059E+04 0.29717245E+02                4
c4h8rCqA                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15836190E+02 0.18276053E-01-0.48705583E-05 0.65426875E-09-0.35914597E-13   2
-0.84518262E+04-0.48764397E+02 0.14225247E+01 0.59792988E-01-0.50404382E-04   3
 0.23572246E-07-0.44956040E-11-0.44562437E+04 0.25527254E+02                4
c4h8rDqA                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16399406E+02 0.17848140E-01-0.47433541E-05 0.63675132E-09-0.34983135E-13   2
-0.75573428E+04-0.52082130E+02 0.60832828E+00 0.64633384E-01-0.58237252E-04   3
 0.29281617E-07-0.61640532E-11-0.32629905E+04 0.28944464E+02                4
c4h8rAqB                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17164682E+02 0.17129254E-01-0.44909089E-05 0.59581257E-09-0.32413129E-13   2
-0.10683619E+05-0.56888702E+02-0.28616673E+00 0.71833134E-01-0.71955736E-04   3
 0.39939927E-07-0.91607989E-11-0.61067861E+04 0.31853411E+02                4
c4h8rCqB                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16552919E+02 0.17643027E-01-0.46683172E-05 0.62521122E-09-0.34322442E-13   2
-0.11206274E+05-0.53300163E+02 0.54561597E+00 0.66874735E-01-0.63849686E-04   3
 0.33968135E-07-0.74029021E-11-0.69497178E+04 0.28361181E+02                4
c4h8rDqB                 c   4h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17199587E+02 0.17067039E-01-0.44542708E-05 0.58712485E-09-0.31697667E-13   2
-0.10345285E+05-0.57083076E+02-0.30731210E+00 0.71974047E-01-0.72281437E-04   3
 0.40254292E-07-0.92689320E-11-0.57521777E+04 0.31943792E+02                4
c4h8qjAqA                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20391235E+02 0.18253328E-01-0.46773666E-05 0.61028504E-09-0.32827999E-13   2
-0.30022582E+05-0.71210388E+02 0.36108353E+01 0.48481815E-01 0.80780710E-05   3
-0.47805617E-07 0.22261772E-10-0.24963180E+05 0.18663290E+02                4
c4h8qjBqA                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21167318E+02 0.18341102E-01-0.48231136E-05 0.64272282E-09-0.35146416E-13   2
-0.28514543E+05-0.73493263E+02 0.12464113E+01 0.75056180E-01-0.62279512E-04   3
 0.24012136E-07-0.27494615E-11-0.23098533E+05 0.29017382E+02                4
c4h8qjCqA                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21235804E+02 0.18219627E-01-0.47519902E-05 0.62594929E-09-0.33771851E-13   2
-0.28813791E+05-0.73874031E+02 0.12393204E+01 0.75103648E-01-0.62390653E-04   3
 0.24121507E-07-0.27879452E-11-0.23369484E+05 0.29048790E+02                4
c4h8qjDqA                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20459984E+02 0.18947383E-01-0.50042804E-05 0.66612793E-09-0.36245394E-13   2
-0.26033139E+05-0.69698662E+02 0.22620471E+01 0.67043088E-01-0.46687997E-04   3
 0.11577567E-07 0.84215762E-12-0.20892023E+05 0.24897638E+02                4
c4h8qjAqB                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21167318E+02 0.18341102E-01-0.48231136E-05 0.64272282E-09-0.35146416E-13   2
-0.28514584E+05-0.74186813E+02 0.12686193E+01 0.74901491E-01-0.61907209E-04   3
 0.23640323E-07-0.26179115E-11-0.23100893E+05 0.28230011E+02                4
c4h8qjCqB                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21888067E+02 0.17680371E-01-0.45973793E-05 0.60718119E-09-0.32980075E-13   2
-0.31535605E+05-0.78729637E+02 0.63410324E+00 0.80357298E-01-0.71632960E-04   3
 0.30559153E-07-0.43843913E-11-0.25892623E+05 0.30032263E+02                4
c4h8qjDqB                c   4h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21233110E+02 0.18224197E-01-0.47545814E-05 0.62654804E-09-0.33820220E-13   2
-0.28812553E+05-0.73860313E+02 0.11942649E+01 0.75426735E-01-0.63191830E-04   3
 0.24944015E-07-0.30860438E-11-0.23364816E+05 0.29236444E+02                4
c4h8o#3                  c   4h   8o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10841183E+02 0.23146855E-01-0.82291308E-05 0.13544756E-08-0.85270712E-13   2
-0.21876010E+05-0.35098042E+02-0.22656769E+00 0.47344849E-01-0.16799813E-04   3
-0.10017525E-07 0.67284481E-11-0.18570105E+05 0.23529854E+02                4
c4h8o#4                  c   4h   8o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34796059E+01 0.37815239E-01-0.16010379E-04 0.29808809E-08-0.20474120E-12   2
-0.18373701E+05 0.46433411E+01-0.80936937E+01 0.88622943E-01-0.11073386E-03   3
 0.82279641E-07-0.24164665E-10-0.15662465E+05 0.60699963E+02                4
c4h8o#5  Burcat   T 3/97c   4h   8o   1    0G   200.000  5000.000 1000.      1
 6.97323971E+00 2.88949921E-02-1.16992973E-05 2.17090268E-09-1.51075478E-13   2
```

```
-2.67236416E+04-1.44239686E+01 4.08780471E+00-1.16647870E-02 1.44507977E-04    3
-1.83315676E-07 7.25734431E-11-2.38006675E+04 1.16117821E+01-2.21516361E+04    4
c4h7oAqB                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.51565738E+01 0.38813442E-01-0.15359050E-04 0.27266063E-08-0.18103656E-12    2
-0.39197348E+05 0.12134422E+02 0.12349727E+01 0.61525494E-01-0.43655171E-04    3
 0.10995143E-07 0.10105405E-11-0.39505184E+05 0.27605818E+02                   4
c4h7oAqC                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15024737E+01 0.44505898E-01-0.18186340E-04 0.33031475E-08-0.22294181E-12    2
-0.38647719E+05 0.33030746E+02 0.24198382E+01 0.58522277E-01-0.42271160E-04    3
 0.11203908E-07 0.96926048E-12-0.40758629E+05 0.21788208E+02                   4
c4h7oAqD                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56509681E+01 0.36858574E-01-0.14185181E-04 0.24689291E-08-0.16163333E-12    2
-0.37817258E+05 0.10409409E+02 0.27760043E+01 0.55114768E-01-0.37819718E-04    3
 0.99687698E-08 0.55395418E-12-0.38210289E+05 0.21151186E+02                   4
c4h7oBqA                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15861348E+01 0.43479957E-01-0.17494467E-04 0.31422394E-08-0.21036531E-12    2
-0.39324336E+05 0.32575222E+02 0.32593753E+01 0.53690277E-01-0.37290840E-04    3
 0.10202242E-07 0.58889433E-12-0.41428801E+05 0.18151604E+02                   4
c4h7oBqC                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65961237E+01 0.36197469E-01-0.14020626E-04 0.24535096E-08-0.16135044E-12    2
-0.43461812E+05 0.34785538E+01 0.10589478E+01 0.60405202E-01-0.41287476E-04    3
 0.97695727E-08 0.10831664E-11-0.43017469E+05 0.28403883E+02                   4
c4h7oBqD                c   4h   8o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71798754E+01 0.34119871E-01-0.12807865E-04 0.21916260E-08-0.14183713E-12    2
-0.42121785E+05 0.12404099E+01 0.27280753E+01 0.53121392E-01-0.33396540E-04    3
 0.67355481E-08 0.13214138E-11-0.41736484E+05 0.21404715E+02                   4
nc4h9o2h                c   4h  10o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13364201E+02 0.26301583E-01-0.87335775E-05 0.13712343E-08-0.83620455E-13    2
-0.33745547E+05-0.38009354E+02 0.83388466E+00 0.60939860E-01-0.39002498E-04    3
 0.78341813E-08 0.16028346E-11-0.30397754E+05 0.26467260E+02                   4
c4h7o2h                 c   4h   8o   2    G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13162507E+02 0.21643989E-01-0.71929812E-05 0.11303418E-08-0.68989261E-13    2
-0.17694191E+05-0.36459305E+02 0.22901256E+01 0.47590896E-01-0.18961156E-04    3
-0.95546548E-08 0.73198019E-11-0.14679048E+05 0.20296099E+02                   4
c4h7e1qB                c   4h   8o   2    G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12377043E+02 0.23240978E-01-0.79734837E-05 0.12817828E-08-0.79485734E-13    2
-0.17037293E+05-0.33649040E+02 0.25435202E+01 0.50029602E-01-0.30610132E-04    3
 0.52741331E-08 0.16029609E-11-0.14387111E+05 0.17056837E+02                   4
c4h7oq                  c   4h   8o   3    G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16870092E+02 0.68185821E-01-0.24252884E-04 0.39975974E-08-0.25215041E-12    2
-0.39237465E+05-0.53114212E+02-0.18994358E+00 0.10673244E+00-0.35085766E-04    3
-0.21366752E-07 0.14464667E-10-0.34442055E+05 0.36377739E+02                   4
nc3h7hco   7/ 6/ 7 ThERMc   4h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1682.000    31
 1.41450352E+01 1.74573447E-02-6.52091596E-06 1.07698621E-09-6.53071212E-14    2
-3.15823365E+04-4.69411192E+01 1.96951197E+00 4.07099592E-02-2.01237756E-05    3
 3.07139892E-09 1.91826442E-13-2.71017064E+04 1.99486292E+01                   4
c3h7co                  c   4h   7o   1    G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.47072029E+01 0.26826609E-01-0.91171314E-05 0.14559267E-08-0.89873231E-13    2
-0.96920791E+04 0.80605698E+01 0.14006841E+01 0.43548554E-01-0.33324701E-04    3
 0.14819613E-07-0.26685743E-11-0.95025234E+04 0.22473145E+02                   4
c4h7oh                  c   4h   8o   1    G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
ac3h5hco                c   4h   6o   1    G   0300.00   5000.00  1390.00    21
 1.22811161E+01 1.50167397E-02-5.17605303E-06 8.07796972E-10-4.70379360E-14    2
-1.50985283E+04-3.72055710E+01 1.59653121E-01 4.25761347E-02-2.91900593E-05    3
 1.04044255E-08-1.53682904E-12-1.07859656E+04 2.82087323E+01                   4
ac3h5co    2/29/96 thermc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    21
 1.18646590e+01 1.28852832e-02-4.45460888e-06 6.96613045e-10-4.06215490e-14    2
 3.86344452e+03-3.32989999e+01 9.34300027e-01 3.77751824e-02-2.61384581e-05    3
```

```
 9.34041036e-09-1.37598294e-12 7.74223639e+03 2.56636231e+01                   4
c2h3chcho  7/11/ 7 ThERMc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    01
 1.14968064E+01 1.37733667E-02-4.70138379E-06 7.29005353E-10-4.22620853E-14    2
 2.19447743E+03-3.40242711E+01-3.02771175E-01 4.16449784E-02-3.00051898E-05    3
 1.12468306E-08-1.73014503E-12 6.25850862E+03 2.92327697E+01                   4
c4h8o2                  c   4h   8o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
butanone                0c   4h   8o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
  .87888947E+01  .24174010E-01 -.83446403E-05  .13376648E-08 -.82271822E-13    2
 -.33018367E+05 -.17819489E+02  .27316518E+01  .35815358E-01 -.11085016E-04    3
 -.44516226E-08  .28435873E-11 -.31006189E+05  .14949604E+02                   4
mvk     Therm Curran   0c   4h   6o   1    G   300.000  5000.000 1386.00     21
 1.25571995e+01 1.49672645e-02-5.20015351e-06 8.15864365e-10-4.76824406e-14    2
-2.14622958e+04-4.01434299e+01 2.45578501e-01 4.26432049e-02-2.91126822e-05    3
 1.03478392e-08-1.53551381e-12-1.70305379e+04 2.64430799e+01                   4
ch2coc2h3  3/19/ 7 ThERMc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    11
 1.33454164E+01 1.21412652E-02-4.21795603E-06 6.61780536E-10-3.86794162E-14    2
-1.18714134E+02-4.37083473E+01 1.23886663E-01 4.57286980E-02-3.77356197E-05    3
 1.61754307E-08-2.81683350E-12 4.22224991E+03 2.63746546E+01                   4
mhd                     c   7h  12o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29266400E+01 0.14879800E-02-0.56848000E-06 0.10097000E-09-0.67500000E-14    2
-0.92280000E+03 0.59810000E+01 0.32986800E+01 0.14082400E-02-0.39632200E-05    3
 0.56415100E-08-0.24448500E-11-0.10209000E+04 0.39500000E+01                   4
h2c4o                   c   4h   2o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82939720E+01 0.92993790E-02-0.37389950E-05 0.69422900E-09-0.48285830E-13    2
 0.24080810E+05-0.17659360E+02 0.64205590E+01 0.65418440E-03 0.35099640E-04    3
-0.45154730E-07 0.17480640E-10 0.25287060E+05-0.45916500E+01                   4
c4h                     c   4h   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.06242882E+02 0.06193682E-01-0.02085931E-04 0.03082203E-08-0.16364826E-13    2
 0.07568019E+06-0.07210806E+02 0.05023247E+02 0.07092375E-01-0.06073762E-07    3
-0.02275752E-07 0.08086994E-11 0.07623812E+06-0.06942594E+00                   4
c4h6o2h                 c   4h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.74540000E+03 0.43660000E+01 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.74540000E+03 0.43660000E+01                   4
hoc4h6                  c   4h   7o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10610400E+02 0.17761390E-01-0.51479730E-05 0.73525370E-09-0.42104080E-13    2
-0.76044290E+04-0.25888690E+02 0.58910820E+00 0.44971440E-01-0.32455210E-04    3
 0.13392720E-07-0.25772260E-11-0.47430910E+04 0.26194140E+02                   4
ch3chch2hco    11/14/07 c   4h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.50431247E+01 0.26404748E-01-0.89352470E-05 0.14221639E-08-0.87567479E-13    2
-0.40176113E+04 0.68120537E+01 0.93049204E+00 0.49576141E-01-0.47239231E-04    3
 0.26812840E-07-0.62247768E-11-0.38429084E+04 0.24272457E+02                   4
c3h6cho-1    3/19/7ThERMc   4h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 1.30322954E+01 1.62418373E-02-5.54388124E-06 8.59723685E-10-4.98459726E-14    2
-6.45915975E+03-3.85453878E+01 2.67672303E+00 3.73064128E-02-2.11281405E-05    3
 5.80472681E-09-6.09688236E-13-2.49714183E+03 1.82696076E+01                   4
ch3coc2h4p 6/21/95  therc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1380.00     31
 1.24694368e+01 1.71022143e-02-5.92156726e-06 9.26816806e-10-5.40730504e-14    2
-1.01378242e+04-3.62186375e+01 2.40255609e+00 3.67294268e-02-1.97316510e-05    3
 5.07323216e-09-4.99655275e-13-6.15006886e+03 1.93993386e+01                   4
ch3coc2h4o2  05/12/08   c   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.89678164E+01 0.28008044E-01-0.94482430E-05 0.15002523E-08-0.92210656E-13    2
-0.25006693E+05-0.10102364E+02 0.13262078E+01 0.57507858E-01-0.45322631E-04    3
 0.17575857E-07-0.21632667E-11-0.23761553E+05 0.26280613E+02                   4
ch3coc2h4o2h  05/12/08  c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.71798754E+01 0.34119871E-01-0.12807865E-04 0.21916260E-08-0.14183713E-12    2
-0.42121785E+05 0.12404099E+01 0.27280753E+01 0.53121392E-01-0.33396540E-04    3
 0.67355481E-08 0.13214138E-11-0.41736484E+05 0.21404715E+02                   4
```

```
ch3coc2h4o   05/12/08   c   4h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66583276E+01 0.27749667E-01-0.94368897E-05 0.15065660E-08-0.92921114E-13    2
-0.24186270E+05-0.10899277E+01 0.54507318E-03 0.52965928E-01-0.40301915E-04    3
 0.15869045E-07-0.21622910E-11-0.23025023E+05 0.30846504E+02                   4
c2h5coch2  6/22/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1380.00     31
 1.24694368e+01 1.71022143e-02-5.92156726e-06 9.26816806e-10-5.40730504e-14    2
-1.32581060e+04-3.69081191e+01 2.40255609e+00 3.67294268e-02-1.97316510e-05    3
 5.07323216e-09-4.99655275e-13-9.27035071e+03 1.87098570e+01                   4
c2h5coch2o2  05/12/08   c   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.38571138E+01 0.36268853E-01-0.13350632E-04 0.22542255E-08-0.14458411E-12    2
-0.22358531E+05 0.18663910E+02 0.21409371E+01 0.56118496E-01-0.44536089E-04    3
 0.16397523E-07-0.12623584E-11-0.23484295E+05 0.21826933E+02                   4
c2h5coch2o2h 05/12/08   c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.16406878E+01 0.43388542E-01-0.17453762E-04 0.31352956E-08-0.20996311E-12    2
-0.39345242E+05 0.32271141E+02 0.33874428E+01 0.52805789E-01-0.35180026E-04    3
 0.81136662E-08 0.13204503E-11-0.41442543E+05 0.17608814E+02                   4
c2h5coch2o   05/12/08   c   4h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.15474685E+01 0.36030553E-01-0.13362954E-04 0.22669999E-08-0.14581819E-12    2
-0.21541277E+05 0.27668835E+02 0.62256747E+00 0.52915037E-01-0.42734497E-04    3
 0.17907073E-07-0.24005721E-11-0.22727172E+05 0.27209444E+02                   4
ch3coc2h4qj             c   4h   7o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.89678164E+01 0.28008044E-01-0.94482430E-05 0.15002523E-08-0.92210656E-13    2
-0.25006693E+05-0.10102364E+02 0.13262078E+01 0.57507858E-01-0.45322631E-04    3
 0.17575857E-07-0.21632667E-11-0.23761553E+05 0.26280613E+02                   4
ch2coc2h4q              c   4h   7o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98089294E+01 0.27196663E-01-0.91477141E-05 0.14500172E-08-0.89042861E-13    2
-0.19584631E+05-0.12753021E+02 0.18203707E+01 0.59974179E-01-0.52311527E-04    3
 0.23730996E-07-0.40058928E-11-0.18383766E+05 0.24786594E+02                   4
ch2qjcoc2h4q            c   4h   7o   5    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.70274129E+01 0.38263414E-01-0.13915499E-04 0.23291760E-08-0.14845631E-12    2
-0.33247496E+05 0.10160912E+02 0.39831936E+01 0.65486819E-01-0.54516993E-04    3
 0.19785215E-07-0.12096370E-11-0.34432922E+05 0.18713594E+02                   4
c4e1ojC    4/ 3/ 0 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.53137780e+01 1.43427017e-02-4.81625517e-06 7.39574839e-10-4.26140814e-14    2
-7.29342884e+02-5.52937859e+01-1.60619192e+00 5.58562682e-02-4.35595767e-05    3
 1.70589279e-08-2.65635180e-12 4.85090326e+03 3.47112559e+01                   4
c2h5coch2qj    11/20/07 c   4h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.38571138E+01 0.36268853E-01-0.13350632E-04 0.22542255E-08-0.14458411E-12    2
-0.22358531E+05 0.18663910E+02 0.21409371E+01 0.56118496E-01-0.44536089E-04    3
 0.16397523E-07-0.12623584E-11-0.23484295E+05 0.21826933E+02                   4
ch3chcoch2q    11/20/07 c   4h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.42394428E+01 0.35741135E-01-0.13102807E-04 0.22049429E-08-0.14103318E-12    2
-0.19761291E+05 0.18116451E+02 0.35533347E+01 0.54249760E-01-0.45959878E-04    3
 0.19584725E-07-0.24972672E-11-0.21250836E+05 0.15571623E+02                   4
ch3chqjcoch2q  11/20/07 c   4h   7o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.66088834E+01 0.40016297E-01-0.14921512E-04 0.25411044E-08-0.16389102E-12    2
-0.34647473E+05 0.12188988E+02 0.22339897E+01 0.73329173E-01-0.63757965E-04    3
 0.24175502E-07-0.19309962E-11-0.35705379E+05 0.26745338E+02                   4
c4h8hco-2  2/25/ 9 ThERGc   5h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.66388712E+01 0.33017617E-01-0.11292109E-04 0.18096782E-08-0.11189883E-12    2
-0.73563232E+04 0.31517792E+00 0.57747954E+00 0.62373504E-01-0.56432193E-04    3
 0.30307202E-07-0.67590638E-11-0.67211289E+04 0.27562559E+02                   4
c4h7hco-1  7/ 6/ 7 ThERMc   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 1.59299730E+01 1.84432887E-02-6.21997362E-06 9.57537306E-10-5.52580126E-14    2
-1.98311071E+04-5.51771737E+01 1.30688261E+00 5.07911858E-02-3.31509980E-05    3
 1.10391295E-08-1.49578391E-12-1.45595753E+04 2.40234219E+01                   4
c4h7co-1   7/ 6/ 7 ThERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 1.54637001E+01 1.64158685E-02-5.54672481E-06 8.55055295E-10-4.93928750E-14    2
-8.55858619E+02-5.10065564E+01 2.09347005E+00 4.59484008E-02-3.00651488E-05    3
 9.99306335E-09-1.34709811E-12 3.96659370E+03 2.14210959E+01                   4
c4h7hco-2  2/25/ 9 ThERMc   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
```

```
 1.50265898E+01 1.98533832E-02-6.83413130E-06 1.06561288E-09-6.20117822E-14    2
-2.05562762E+04-4.97672026E+01 4.19720449E-01 5.14338117E-02-3.24110908E-05    3
 1.03305738E-08-1.33536312E-12-1.51894369E+04 2.96497075E+01                   4
c4h7co-2   2/25/ 9 ThERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 1.46069636E+01 1.77278548E-02-6.11539466E-06 9.54916411E-10-5.56262722E-14    2
-1.59318351E+03-4.58431667E+01 1.19183326E+00 4.66489693E-02-2.93898842E-05    3
 9.28937321E-09-1.18024785E-12 3.33903076E+03 2.71153940E+01                   4
! Base C5
nc5h12                  c   5h  12o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.69037890E+01 0.38945273E-01-0.14318298E-04 0.24153177E-08-0.15480237E-12    2
-0.22813555E+05-0.10285370E+02-0.37944520E+00 0.54735661E-01-0.15632966E-04    3
-0.12797436E-07 0.78605664E-11-0.20787176E+05 0.27959454E+02                   4
Ac5h11                  c   5h  11o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11840229E+02 0.26898146E-01-0.82338529E-05 0.12203893E-08-0.71540992E-13    2
 0.12649160E+04-0.33695976E+02-0.83049029E+00 0.63527279E-01-0.47358484E-04    3
 0.19638760E-07-0.33058777E+01 0.47048857E+04 0.31432556E+02                   4
Bc5h11                  c   5h  11o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11266620E+02 0.28864660E-01-0.10510950E-04 0.18592610E-08-0.12582250E-12    2
-0.36539210E+03-0.29844090E+02 0.68113700E+00 0.48241750E-01-0.79634290E-05    3
-0.21500460E-07 0.11894760E-10 0.31181900E+04 0.27408430E+02                   4
Cc5h11                  c   5h  11o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.94056873E+01 0.30186320E-01-0.96252134E-05 0.14704192E-08-0.88102140E-13    2
 0.11961777E+04-0.20527222E+02-0.10294762E+01 0.64833365E-01-0.51353636E-04    3
 0.22927182E-07-0.39997003E-11 0.36354197E+04 0.31599148E+02                   4
c5h10   Burcat    n 4/87c  5.h 10.   0.   0.G     200.000  6000.000 1000.      1
 1.19501622E+01 2.52159997E-02-8.85685260E-06 1.42602177E-09-8.54794944E-14    2
-8.52115733E+03-3.65337724E+01 5.88359146E+00 5.10403590E-03 9.78286629E-05    3
-1.32389833E-07 5.32233940E-11-5.16825430E+03 3.41988594E+00-2.55938113E+03    4
c2c5h10                 c   5h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98119410E+01 0.28230600E-01-0.10398800E-04 0.18491010E-08-0.12550480E-12    2
-0.84689020E+04-0.25010800E+02-0.29772320E+00 0.44258840E-01-0.86268990E-07    3
-0.29032720E-07 0.14525230E-10-0.50205490E+04 0.30271050E+02                   4
t2c5h10                 c   5h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98119420E+01 0.28230630E-01-0.10398820E-04 0.18491130E-08-0.12550520E-12    2
-0.90727670E+04-0.25715310E+02-0.29836710E+00 0.44263500E-01-0.98045260E-07    3
-0.29020110E-07 0.14520380E-10-0.56243540E+04 0.29569240E+02                   4
Dc5h9-1      11/28/2007 c   5h   9o   0    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13641939E+02 0.18557966E-01-0.51122247E-05 0.70279593E-09-0.39154474E-13    2
 0.14672387E+05-0.43577042E+02-0.47920683E+00 0.57435397E-01-0.48409318E-04    3
 0.25387028E-07-0.61655381E-11 0.18841400E+05 0.30043015E+02                   4
Ac5h9-1                 c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13705730E+02 0.18582760E-01-0.51383140E-05 0.70910480E-09-0.39653520E-13    2
 0.20013520E+05-0.44697850E+02-0.56099670E+00 0.55861020E-01-0.43174220E-04    3
 0.20314560E-07-0.46176200E-11 0.24333980E+05 0.30202250E+02                   4
Bc5h9-1    1/25/ 8 ThERMc   5h   9    0    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.39474859E+01 2.04521287E-02-6.96967387E-06 1.07931978E-09-6.25066129E-14    2
 1.90755987E+04-4.56205587E+01 7.12538388E-01 4.89480531E-02-2.99536208E-05    3
 9.37086243e-09-1.19699264e-12 2.39583024E+04 2.63919649E+01                   4
Cc5h9-1  Burcat         c   5h   9o   0    0G   200.000  6000.000 1000.000    31
 1.11277742E+01 2.38252436E-02-8.44023460E-06 1.34549364E-09-7.97578298E-14    2
 8.68711411E+03-3.07833429E+01 2.34425040E+00 3.21504141E-02 2.45295981E-05    3
-5.81110933E-08 2.68653496E-11 1.17932336E+04 1.81635883E+01 1.40357192E+04    4
Ec5h9-1    7/ 2/ 7 ThERMc   5h   9    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 1.41604486E+01 2.02710046E-02-6.90765357E-06 1.06972742E-09-6.19529514E-14    2
 1.49795090E+04-4.65356181E+01-3.00352280E-01 5.29029897E-02-3.50199571E-05    3
 1.21280172E-08-1.74459793E-12 2.01482388E+04 3.15883658E+01                   4
Dc5h9-2                 c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10808840E+02 0.25114660E-01-0.93133430E-05 0.16620690E-08-0.11304350E-12    2
 0.56809360E+04-0.30597490E+02 0.76094960E+00 0.43405570E-01-0.63094280E-05    3
-0.21376010E-07 0.11678100E-10 0.89833620E+04 0.23749610E+02                   4
c5h11qjA                c   5h  11o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.17693907E+02 0.25206689E-01-0.73175647E-05 0.10446389E-08-0.59711967E-13    2
-0.17954648E+05-0.60869202E+02 0.37462369E+00 0.68274647E-01-0.40443552E-04    3
 0.60420766E-08 0.23256178E-11-0.12853773E+05 0.30001059E+02                   4
c5h11qjB              c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17815870E+02 0.25252532E-01-0.73544652E-05 0.10514271E-08-0.60109863E-13    2
-0.20360367E+05-0.61852409E+02 0.45328522E+01 0.41307453E-01 0.24998693E-04    3
-0.58668839E-07 0.24622018E-10-0.15895555E+05 0.11408155E+02                   4
c5h11qjC              c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17815870E+02 0.25252532E-01-0.73544652E-05 0.10514271E-08-0.60109863E-13    2
-0.20088693E+05-0.62546471E+02 0.45702310E+01 0.41049715E-01 0.25613848E-04    3
-0.59279056E-07 0.24836746E-10-0.15627834E+05 0.10555774E+02                   4
c5h10rAqA             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18165686E+02 0.23514722E-01-0.65243621E-05 0.90092245E-09-0.50308390E-13    2
-0.13890614E+05-0.59234383E+02 0.49283785E+00 0.76717511E-01-0.68574533E-04    3
 0.34870865E-07-0.74775854E-11-0.91428008E+04 0.31201130E+02                   4
c5h10rBqA             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18197788E+02 0.23485268E-01-0.65141744E-05 0.89930724E-09-0.50209694E-13    2
-0.12037074E+05-0.59406296E+02 0.46351600E+00 0.76954529E-01-0.68934860E-04    3
 0.35055390E-07-0.74986363E-11-0.72798706E+04 0.31315548E+02                   4
c5h10rCqA             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18188309E+02 0.23501348E-01-0.65232957E-05 0.90142627E-09-0.50382370E-13    2
-0.12032990E+05-0.59352737E+02 0.41875389E+00 0.77245265E-01-0.69588270E-04    3
 0.35668727E-07-0.77042374E-11-0.72747871E+04 0.31507940E+02                   4
c5h10rDqA             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17981339E+02 0.23902215E-01-0.66944849E-05 0.93115105E-09-0.52278270E-13    2
-0.11997775E+05-0.58303978E+02 0.14070796E+01 0.70242055E-01-0.53939111E-04    3
 0.21400107E-07-0.30121725E-11-0.73704863E+04 0.27386412E+02                   4
c5h10rEqA             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18553434E+02 0.23457348E-01-0.65568925E-05 0.91130709E-09-0.51169931E-13    2
-0.11106689E+05-0.61670769E+02 0.64285290E+00 0.74731119E-01-0.60917569E-04    3
 0.26247735E-07-0.43729946E-11-0.61825083E+04 0.30592690E+02                   4
c5h10rAqB             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18656134E+02 0.23536196E-01-0.66126163E-05 0.92265695E-09-0.51956120E-13    2
-0.13857056E+05-0.62549164E+02 0.49879084E+01 0.46478335E-01 0.75884550E-05    3
-0.41499785E-07 0.18991593E-10-0.95966904E+04 0.11204841E+02                   4
c5h10rBqB             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17709667E+02 0.24069384E-01-0.67498613E-05 0.94133845E-09-0.53032106E-13    2
-0.17075113E+05-0.57344658E+02 0.53862910E+01 0.45521099E-01 0.36585106E-05    3
-0.34866385E-07 0.16336033E-10-0.13272936E+05 0.89649525E+01                   4
c5h10rCqB             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18317825E+02 0.23533041E-01-0.65516374E-05 0.90639368E-09-0.50651208E-13    2
-0.14441848E+05-0.60380569E+02 0.46930351E+01 0.49489446E-01-0.22892000E-05    3
-0.30863038E-07 0.15226929E-10-0.10329230E+05 0.12418933E+02                   4
c5h10rDqB             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18103209E+02 0.23947487E-01-0.67307633E-05 0.93793984E-09-0.52691758E-13    2
-0.14403750E+05-0.59289696E+02 0.57950335E+01 0.41689478E-01 0.15292435E-04    3
-0.47076437E-07 0.20611939E-10-0.10436969E+05 0.78172059E+01                   4
c5h10rEqB             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18678057E+02 0.23497580E-01-0.65901481E-05 0.91738317E-09-0.51525516E-13    2
-0.13513839E+05-0.62672020E+02 0.50832539E+01 0.45818452E-01 0.91703050E-05    3
-0.43075772E-07 0.19548429E-10-0.92546572E+04 0.10800849E+02                   4
c5h10rAqC             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18678057E+02 0.23497580E-01-0.65901481E-05 0.91738317E-09-0.51525516E-13    2
-0.13242098E+05-0.62672020E+02 0.50832539E+01 0.45818452E-01 0.91703050E-05    3
-0.43075772E-07 0.19548429E-10-0.89829160E+04 0.10800845E+02                   4
c5h10rBqC             c   5h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18103209E+02 0.23947487E-01-0.67307633E-05 0.93793984E-09-0.52691758E-13    2
-0.14132009E+05-0.59289703E+02 0.57950335E+01 0.41689478E-01 0.15292435E-04    3
-0.47076437E-07 0.20611939E-10-0.10165229E+05 0.78172021E+01                   4
c5h10qjAqA            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22536865E+02 0.23870159E-01-0.64956016E-05 0.88758306E-09-0.49379751E-13    2
-0.33566445E+05-0.80749680E+02 0.36972833E+01 0.58210768E-01 0.63013604E-05    3
-0.51754320E-07 0.24379488E-10-0.27888119E+05 0.20090536E+02                   4
c5h10qjBqA            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31704240E+05-0.80100067E+02 0.65857382E+01 0.49265649E-01 0.18251547E-04    3
-0.58334717E-07 0.25693662E-10-0.26595586E+05 0.73948445E+01                   4
c5h10qjCqA            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31704148E+05-0.80099495E+02 0.65332913E+01 0.49625736E-01 0.17395208E-04    3
-0.57487750E-07 0.25396334E-10-0.26589920E+05 0.76178002E+01                   4
c5h10qjDqA            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31975850E+05-0.80098167E+02 0.65110831E+01 0.49780425E-01 0.17022903E-04    3
-0.57115933E-07 0.25264783E-10-0.26859299E+05 0.77129507E+01                   4
c5h10qjEqA            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22611748E+02 0.24565097E-01-0.68287231E-05 0.94424624E-09-0.52776732E-13    2
-0.29581564E+05-0.78584877E+02 0.22531765E+01 0.77434152E-01-0.50057977E-04    3
 0.92221484E-08 0.23948675E-11-0.23806771E+05 0.27421509E+02                   4
c5h10qjAqB            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31704240E+05-0.80100182E+02 0.65857382E+01 0.49265649E-01 0.18251547E-04    3
-0.58334717E-07 0.25693662E-10-0.26595586E+05 0.73947296E+01                   4
c5h10qjBqB            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.20487551E+02 0.28428128E-01-0.84972598E-05 0.12383611E-08-0.71771602E-13    2
-0.35009141E+05-0.71761108E+02 0.40527296E+01 0.54920383E-01 0.17344197E-04    3
-0.63876158E-07 0.29235878E-10-0.30017166E+05 0.16731565E+02                   4
c5h10qjCqB            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.24100880E+02 0.23195846E-01-0.63645057E-05 0.87288637E-09-0.48576699E-13    2
-0.34839512E+05-0.87962540E+02 0.66838330E+00 0.90424120E-01-0.74138872E-04    3
 0.27231698E-07-0.24456429E-11-0.28539984E+05 0.32375317E+02                   4
c5h10qjDqB            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.24100880E+02 0.23195846E-01-0.63645057E-05 0.87288637E-09-0.48576699E-13    2
-0.35111121E+05-0.87960960E+02 0.59372818E+00 0.90938896E-01-0.75367512E-04    3
 0.28450476E-07-0.28745201E-11-0.28803697E+05 0.32693100E+02                   4
c5h10qjEqB            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31975957E+05-0.80100540E+02 0.65706697E+01 0.49368002E-01 0.18010354E-04    3
-0.58097960E-07 0.25611062E-10-0.26865682E+05 0.74584398E+01                   4
c5h10qjAqC            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22704323E+02 0.24664732E-01-0.68989102E-05 0.95939101E-09-0.53895243E-13    2
-0.31704217E+05-0.79407333E+02 0.65706697E+01 0.49368002E-01 0.18010354E-04    3
-0.58097960E-07 0.25611062E-10-0.26593941E+05 0.81516495E+01                   4
c5h10qjBqC            c   5h  11o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.24100880E+02 0.23195846E-01-0.63645057E-05 0.87288637E-09-0.48576699E-13    2
-0.34839379E+05-0.88654037E+02 0.59372818E+00 0.90938896E-01-0.75367512E-04    3
 0.28450476E-07-0.28745201E-11-0.28531955E+05 0.32000023E+02                   4
c5h9oAqA              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.76889977E+01 0.68728060E-01-0.29526038E-04 0.55550204E-08-0.38445576E-12    2
-0.46396250E+05 0.84707344E+02-0.15825053E+01 0.79188794E-01-0.58870621E-04    3
 0.16979799E-07 0.85144115E-12-0.51054953E+05 0.42619511E+02                   4
c5h9oAqB              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.68301406E+01 0.45276750E-01-0.17631643E-04 0.30959562E-08-0.20403075E-12    2
-0.42563062E+05 0.52057114E+01 0.10189350E+01 0.73376060E-01-0.50587420E-04    3
 0.12252393E-07 0.12595848E-11-0.42398086E+05 0.30308630E+02                   4
c5h9oAqC              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32461290E+01 0.50813373E-01-0.20346029E-04 0.36429888E-08-0.24340339E-12    2
-0.41764727E+05 0.25726212E+02 0.22568398E+01 0.70007764E-01-0.48333295E-04    3
 0.11598830E-07 0.15216308E-11-0.43385512E+05 0.24266018E+02                   4
c5h9oAqD              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32397523E+01 0.50826870E-01-0.20357975E-04 0.36466417E-08-0.24375529E-12    2
-0.42033457E+05 0.25762238E+02 0.21234810E+01 0.70941411E-01-0.50596915E-04    3
```

```
 0.13877788E-07 0.70879180E-12-0.43643105E+05 0.24829575E+02                   4
c5h9oAqE              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.74287076E+01 0.43161303E-01-0.16387514E-04 0.28254508E-08-0.18376212E-12    2
-0.41227148E+05 0.28907776E+01 0.25404897E+01 0.67104273E-01-0.45098775E-04    3
 0.11588649E-07 0.66803529E-12-0.41101148E+05 0.23936031E+02                   4
c5h9oBqA              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32062416E+01 0.50021708E-01-0.19799412E-04 0.35172454E-08-0.23373455E-12    2
-0.42666461E+05 0.25951569E+02 0.30796070E+01 0.65284565E-01-0.43594682E-04    3
 0.10818820E-07 0.10694418E-11-0.44325527E+05 0.20701454E+02                   4
c5h9oBqC              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.83195457E+01 0.42585067E-01-0.16255251E-04 0.28143641E-08-0.18364147E-12    2
-0.46850172E+05-0.37350693E+01 0.81897014E+00 0.72422400E-01-0.48620390E-04    3
 0.11425844E-07 0.11917078E-11-0.45907824E+05 0.31207972E+02                   4
c5h9oBqD              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.48146667E+01 0.47954872E-01-0.18857243E-04 0.33334702E-08-0.22070384E-12    2
-0.46350164E+05 0.16358330E+02 0.20241070E+01 0.69285154E-01-0.46930687E-04    3
 0.11345183E-07 0.12476532E-11-0.47163527E+05 0.25303612E+02                   4
c5h9oBqE              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.85829544E+01 0.41070454E-01-0.15352405E-04 0.26212037E-08-0.16947529E-12    2
-0.45383957E+05-0.41893387E+01 0.23371372E+01 0.66157855E-01-0.43104665E-04    3
 0.10687289E-07 0.64402910E-12-0.44610309E+05 0.24851892E+02                   4
c5h9oCqA              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.42473073E+01 0.62893398E-01-0.26460075E-04 0.49042108E-08-0.33574093E-12    2
-0.40374328E+05 0.67679298E+02 0.19282467E+01 0.70314690E-01-0.50499875E-04    3
 0.13774643E-07 0.11378653E-11-0.44759590E+05 0.26293476E+02                   4
c5h9oCqB              c   5h  10o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.49886513E+01 0.65406688E-01-0.28030090E-04 0.52636682E-08-0.36376176E-12    2
-0.41678141E+05 0.70718826E+02 0.20620613E+00 0.77964954E-01-0.59267168E-04    3
 0.17677250E-07 0.59496299E-12-0.46034914E+05 0.33516747E+02                   4
c5h10o-AB   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21552544E+02 0.14900521E-01-0.39925217E-05 0.53884580E-09-0.29695325E-13    2
-0.26248236E+05-0.90419800E+02 0.69393861E+00 0.60455352E-01-0.31874799E-04    3
 0.42285957E-08 0.84971646E-12-0.18583396E+05 0.30189991E+02                   4
c5h10o-BC   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18668573E+02 0.19763462E-01-0.60541324E-05 0.89919050E-09-0.52862720E-13    2
-0.27486598E+05-0.75263290E+02-0.10981205E+01 0.64196445E-01-0.37130034E-04    3
 0.62698526E-08 0.97800771E-12-0.21126602E+05 0.30337227E+02                   4
c5h10o-AC   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56944847E+01 0.43825392E-01-0.18080451E-04 0.33056706E-08-0.22413904E-12    2
-0.24403863E+05-0.78636398E+01-0.87576046E+01 0.10453284E+00-0.12373093E-03    3
 0.86439428E-07-0.24114238E-10-0.21094090E+05 0.62346928E+02                   4
c5h10o-BD   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56944847E+01 0.43825392E-01-0.18080451E-04 0.33056706E-08-0.22413904E-12    2
-0.24403863E+05-0.78636398E+01-0.87576046E+01 0.10453284E+00-0.12373093E-03    3
 0.86439428E-07-0.24114238E-10-0.21094090E+05 0.62346928E+02                   4
c5h10o-AD   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.13977613E+02 0.78190595E-01-0.36647951E-04 0.73355220E-08-0.53103745E-12    2
-0.22985982E+05 0.10428535E+03-0.30065763E+01 0.79104722E-01-0.61205654E-04    3
 0.18669297E-07 0.56656784E-12-0.29281148E+05 0.35812504E+02                   4
c5h10o-AE   Thergas      c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.26997976E+02 0.82626529E-02-0.16632739E-05 0.18021683E-09-0.84882552E-14    2
-0.39372523E+05-0.12664341E+03-0.40734100E+00 0.62871918E-01-0.34465607E-04    3
 0.54845390E-08 0.28399169E-12-0.29722307E+05 0.22616488E+02                   4
Ac5h9o#5              c   5h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.10470942E+02 0.67400895E-01-0.29692994E-04 0.56862679E-08-0.39856844E-12    2
-0.36789756E+04 0.87453041E+02-0.24906321E+01 0.77683292E-01-0.65370317E-04    3
 0.23650317E-07-0.10825002E-11-0.92622666E+04 0.34066238E+02                   4
Dc5h9o#5              c   5h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.10640849E+02 0.67008831E-01-0.29337372E-04 0.55934288E-08-0.39081173E-12    2
-0.35511182E+04 0.88210236E+02-0.29632781E+01 0.81959322E-01-0.78074510E-04    3
 0.36931507E-07-0.57385503E-11-0.92231953E+04 0.35484444E+02                   4
```

```
nc5h11o2h             c   5h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14560281E+02 0.33323094E-01-0.11260908E-04 0.17916736E-08-0.11034781E-12    2
-0.36545762E+05-0.42767815E+02 0.60165477E+01 0.36220137E-01 0.39013208E-04    3
-0.72076610E-07 0.29212847E-10-0.33606160E+05 0.55080686E+01                   4
c5h9o2h               c   5h  10o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14782597E+02 0.27906546E-01-0.93661038E-05 0.14842662E-08-0.91231947E-13    2
-0.22487102E+05-0.43542381E+02 0.29475012E+01 0.55770442E-01-0.23849587E-04    3
-0.58748939E-08 0.57273786E-11-0.19080061E+05 0.18587812E+02                   4
c5h9e2qC              c   5h  10o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14439318E+02 0.29251624E-01-0.10087457E-04 0.16286520E-08-0.10135837E-12    2
-0.20634402E+05-0.42994705E+02 0.38227135E+00 0.70956126E-01-0.51958712E-04    3
 0.16021650E-07-0.29235552E-12-0.17032570E+05 0.28589138E+02                   4
nc4h9hco   2/29/96 thermc   5h  10o   1    0g   300.000  5000.000 1381.000    41
 1.67965163e+01 2.25684519e-02-7.67631588e-06 1.18769369e-09-6.87545554e-14    2
-3.56826080e+04-6.09063312e+01 1.59663472e+00 5.43541416e-02-3.21020651e-05    3
 9.35773559e-09-1.06688932e-12-2.99841025e+04 2.21281498e+01                   4
nc4h9co    2/29/96 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1382.000    41
 1.61782939e+01 2.07991920e-02-7.11787892e-06 1.10559975e-09-6.41697187e-14    2
-1.66537752e+04-5.58943579e+01 2.43530238e+00 4.93682376e-02-2.89883082e-05    3
 8.42863812e-09-9.68287172e-13-1.14675541e+04 1.92695879e+01                   4
c3h7coch3  2/22/96 thermc   5h  10o   1    0g   300.000  5000.000 1383.000    41
 1.61841564e+01 2.35245881e-02-8.09675055e-06 1.26230690e-09-7.34487839e-14    2
-3.93375474e+04-5.82980615e+01 1.24037361e+00 5.42494047e-02-3.14825332e-05    3
 9.14492321e-09-1.07665566e-12-3.36276472e+04 2.36150068e+01                   4
nc3h7coch2 2/22/96 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    31
 1.61502419e+01 2.14093466e-02-7.36059614e-06 1.14656816e-09-6.66712722e-14    2
-1.76968561e+04-5.83864884e+01 9.58299271e-01 5.68162532e-02-3.99112781e-05    3
 1.52671514e-08-2.49221047e-12-1.23062238e+04 2.34112884e+01                   4
nc3h7coch2o2          c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1397.000    1
 0.54157181E+01 0.42952433E-01-0.15750606E-04 0.26517366E-08-0.16970428E-12    2
-0.25683588E+05 0.12367142E+02 0.18712276E+01 0.68332709E-01-0.52316103E-04    3
 0.18470732E-07-0.12903681E-11-0.26371352E+05 0.24761251E+02                   4
nc3h7coch2o2h         c   5h  10o   3    0G   300.000  5000.000 1397.000    1
 0.32062416E+01 0.50021708E-01-0.19799412E-04 0.35172454E-08-0.23373455E-12    2
-0.42666461E+05 0.25951569E+02 0.30796070E+01 0.65284565E-01-0.43594682E-04    3
 0.10818820E-07 0.10694418E-11-0.44325527E+05 0.20701454E+02                   4
nc3h7coch2o           c   5h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1397.000    1
 0.30489545E+01 0.42815499E-01-0.15822989E-04 0.26788869E-08-0.17213252E-12    2
-0.24843346E+05 0.21691303E+02 0.43079329E+00 0.64583957E-01-0.49194728E-04    3
 0.18655225E-07-0.19575899E-11-0.25622494E+05 0.29815250E+02                   4
c3h6coch3-1 2/22/96 thrmc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1381.000    41
 1.58052948e+01 2.12787457e-02-7.31842496e-06 1.14049355e-09-6.63446381e-14    2
-1.42827587e+04-5.34016678e+01 2.00033269e+00 4.96074565e-02-2.87470600e-05    3
 8.26666830e-09-9.51074212e-13-9.01010845e+03 2.22761791e+01                   4
ch3coc3h6o2-1 14/04/09  c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.10502599E+02 0.34717854E-01-0.11847791E-04 0.18954198E-08-0.11703724E-12    2
-0.28320859E+05-0.16261261E+02 0.11584612E+01 0.69010183E-01-0.51379146E-04    3
 0.17913694E-07-0.15714131E-11-0.26659459E+05 0.28783268E+02                   4
ch3coc3h6o2h-1 14/04/09 c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.85829544E+01 0.41070454E-01-0.15352405E-04 0.26212037E-08-0.16947529E-12    2
-0.45383957E+05-0.41893387E+01 0.23371372E+01 0.66157855E-01-0.43104665E-04    3
 0.10687289E-07 0.64402910E-12-0.44610309E+05 0.24851892E+02                   4
ch3coc3h6o-1  14/04/09  c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.82549505E+01 0.34366488E-01-0.11802034E-04 0.18970125E-08-0.11754458E-12    2
-0.27525928E+05-0.75977020E+01-0.23651019E+00 0.64951554E-01-0.47530280E-04    3
 0.17391876E-07-0.19963909E-11-0.25915533E+05 0.33643047E+02                   4
c3h6coch3-2 2/22/96 thrmc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 2017.000    41
 1.36994763e+01 2.33997602e-02-8.20838083e-06 1.30268499e-09-7.69151198e-14    2
-1.44773517e+04-4.04820065e+01 2.20585184e+00 4.59605697e-02-2.23175553e-05    3
 4.03645332e-09-1.91585252e-14-1.02918446e+04 2.24556304e+01                   4
c3h6coch3-3 2/22/96 thrmc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    31
```

```
 1.57976789e+01 2.17091054e-02-7.46487769e-06 1.16300253e-09-6.76366022e-14    2
-1.89670489e+04-5.65047695e+01 6.36829393e-01 5.50047719e-02-3.53220538e-05    3
 1.18237807e-08-1.65550023e-12-1.34221768e+04 2.57839238e+01                   4
c2h5coc2h5 2/22/96 thermc   5h  10o   1    0g   300.000  5000.000 1376.000    41
 1.67131896e+01 2.24769805e-02-7.61830162e-06 1.17658492e-09-6.80456888e-14    2
-3.96020446e+04-6.15362004e+01 1.59094611e+00 5.45541559e-02-3.33407641e-05    3
 1.05931387e-08-1.42002914e-12-3.39282740e+04 2.09983080e+01                   4
c2h5coc2h4p 2/22/96 thrmc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1376.000    41
 1.62000827e+01 2.05106647e-02-6.96977982e-06 1.07826230e-09-6.24324406e-14    2
-1.45067221e+04-5.52272610e+01 2.39449461e+00 4.98731839e-02-3.07394387e-05    3
 9.95080260e-09-1.37570832e-12-9.32123954e+03 2.01162807e+01                   4
c2h5coc2h4o2            c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1397.000     1
-0.16824859E+01 0.54905087E-01-0.21688951E-04 0.38464245E-08-0.25524908E-12    2
-0.23483279E+05 0.52257229E+02 0.75269967E+00 0.73139712E-01-0.58698821E-04    3
 0.20920682E-07-0.10489410E-11-0.26808982E+05 0.30212875E+02                   4
c2h5coc2h4o2h           c   5h  10o   3    0G   300.000  5000.000 1397.000     1
-0.42238784E+01 0.62854938E-01-0.26445996E-04 0.49027382E-08-0.33574131E-12    2
-0.40382742E+05 0.67549568E+02 0.18963666E+01 0.70548639E-01-0.51094510E-04    3
 0.14400936E-07 0.90495184E-12-0.44756355E+05 0.26426725E+02                   4
c2h5coc2h4o             c   5h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1397.000     1
-0.40753274E+01 0.54841891E-01-0.21822059E-04 0.38897738E-08-0.25905057E-12    2
-0.22637195E+05 0.61712875E+02-0.79088342E+00 0.70102796E-01-0.57278114E-04    3
 0.22793607E-07-0.23106920E-11-0.26049037E+05 0.35703491E+02                   4
c2h5coc2h4s 2/22/96 thrmc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1385.000    41
 1.61904470e+01 2.12169293e-02-7.35412919e-06 1.15187377e-09-6.72380864e-14    2
-1.92650763e+04-5.84937265e+01 1.10728106e+00 5.48902970e-02-3.67695939e-05    3
 1.32867426e-08-2.06966690e-12-1.37435363e+04 2.32804315e+01                   4
c2h5coc2h4qj 11/13/07   c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.17583377E+01 0.55035233E-01-0.21755652E-04 0.38602375E-08-0.25626303E-12    2
-0.23453463E+05 0.52680286E+02 0.69369799E+00 0.73542967E-01-0.59649879E-04    3
 0.21850004E-07-0.13702839E-11-0.26802596E+05 0.30463516E+02                   4
ch3chcoc2h4q 11/13/07   c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14162014E+01 0.54571912E-01-0.21541102E-04 0.38183212E-08-0.25330337E-12    2
-0.20838969E+05 0.52371223E+02 0.22790766E+01 0.70479408E-01-0.58204656E-04    3
 0.22171779E-07-0.15903023E-11-0.24587775E+05 0.23485855E+02                   4
ch3chqjcoc2h4q 11/13/07 c   5h   9o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.92725044E+00 0.58932081E-01-0.23435967E-04 0.41754116E-08-0.27795932E-12    2
-0.35721227E+05 0.45864994E+02 0.90637571E+00 0.89933135E-01-0.76922297E-04    3
 0.27702171E-07-0.13638130E-11-0.39036617E+05 0.34180515E+02                   4
c2h5coc2h3 2/22/96 thermc   5h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1387.000    31
 1.55916947e+01 1.96028302e-02-6.79737285e-06 1.06496015e-09-6.21767189e-14    2
-2.55988351e+04-5.53302818e+01 4.89126432e-01 5.49951823e-02-3.96989101e-05    3
 1.55700373e-08-2.60070818e-12-2.02458499e+04 2.59411142e+01                   4
pc2h4coc2h3 2/22/96 thrmc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1404.000    31
 1.26732841e+01 2.02366192e-02-6.61089203e-06 9.93878746e-10-5.63457733e-14    2
 7.74011225e+02-3.54543594e+01 7.62539679e-01 5.35805655e-02-4.36465022e-05    3
 1.99232699e-08-3.73335386e-12 4.42260800e+03 2.66604751e+01                   4
sc2h4coc2h3 2/22/96 thrmc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    31
 1.58074213e+01 1.69721022e-02-5.91317608e-06 9.29449082e-10-5.43903161e-14    2
-5.49230389e+03-5.69867205e+01-1.60114035e-01 5.57954071e-02-4.31353298e-05    3
 1.76457444e-08-2.99384261e-12-3.12060218e+01 2.83440609e+01                   4
divinket   7/ 9/ 7 ThERMc   5h   6o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    01
 1.40969002E+01 1.66372730E-02-5.68150597E-06 8.80987290E-10-5.10645507E-14    2
-1.15279792E+04-4.77941549E+01-5.81115947E-01 5.54674429E-02-4.64651368E-05    3
 2.07833582E-08-3.78872500E-12-6.82272285E+03 2.95280694E+01                   4
c5h9oh                  c   5h  10o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
c5h10qj                 c   5h  10o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
```

```
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
c5h8-12                 c   5h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11702852E+02 0.20550847E-01-0.68724235E-05 0.10855719E-08-0.66538097E-13    2
 0.11624912E+05-0.35413887E+02 0.73222780E+00 0.45764759E-01-0.24473251E-04    3
 0.33784284E-08 0.98663807E-12 0.15071673E+05 0.22927427E+02                   4
c5h8-13                 c   5h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11111070E+02 0.21904440E-01-0.79576330E-05 0.14096580E-08-0.95583170E-13    2
 0.39057420E+04-0.33442260E+02-0.17544870E+01 0.59932510E-01-0.49869920E-04    3
 0.21066050E-07-0.30022020E-11 0.73952550E+04 0.32532450E+02                   4
c5h8-14    7/ 2/ 7 ThERMc   5h   8    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 1.35352242E+01 1.85170786E-02-6.26984814E-06 9.66983255E-10-5.58485033E-14    2
 6.00118884E+03-4.62552894E+01-1.64766327E+00 5.54190112E-02-4.12156069E-05    3
 1.62877209E-08-2.66483052E-12 1.11493804E+04 3.48094470E+01                   4
c5h7                    c   5h   70   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12579770E+02 0.19874560E-01-0.81781220E-05 0.15382900E-08-0.10788240E-12    2
 0.20662890E+05-0.42998120E+02 0.35851930E+01 0.17591910E-01 0.56025510E-04    3
-0.87882890E-07 0.36386910E-10 0.24453920E+05 0.99984010E+01                   4
c5oBqjA        11/20/07 c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54623504E+01 0.42873766E-01-0.15709502E-04 0.26429752E-08-0.16904190E-12    2
-0.25702295E+05 0.12106483E+02 0.17463602E+01 0.69202825E-01-0.54415876E-04    3
 0.20575861E-07-0.20384592E-11-0.26358047E+05 0.25289482E+02                   4
Cc5oBqA        11/20/07 c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61094413E+01 0.41810937E-01-0.15194381E-04 0.25412006E-08-0.16184372E-12    2
-0.23156301E+05 0.10021126E+02 0.23956940E+01 0.72839014E-01-0.67947141E-04    3
 0.34523246E-07-0.67289195E-11-0.24054438E+05 0.22004173E+02                   4
c5oBqAqjC      11/20/07 c   5h   9o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.83225765E+01 0.46442643E-01-0.17200686E-04 0.29158942E-08-0.18749409E-12    2
-0.38033980E+05 0.43289032E+01 0.21073031E+01 0.84572539E-01-0.69264512E-04    3
 0.24043253E-07-0.12018551E-11-0.38608016E+05 0.28375637E+02                   4
Ec5oB          11/20/07 c   5h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.84112520E+01 0.30479014E-01-0.10173741E-04 0.16042790E-08-0.98178593E-13    2
-0.10652657E+05-0.10425461E+02-0.39275306E+00 0.65943569E-01-0.61506849E-04    3
 0.34369855E-07-0.81946819E-11-0.90419854E+04 0.31694725E+02                   4
c5oBqjE        11/20/07 c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.10502599E+02 0.34717854E-01-0.11847791E-04 0.18954198E-08-0.11703724E-12    2
-0.28320859E+05-0.16261261E+02 0.11584612E+01 0.69010183E-01-0.51379146E-04    3
 0.17913694E-07-0.15714131E-11-0.26659459E+05 0.28783268E+02                   4
Cc5oBqE        11/20/07 c   5h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.10992082E+02 0.33954728E-01-0.11520006E-04 0.18387609E-08-0.11353867E-12    2
-0.25714953E+05-0.17498596E+02 0.16603444E+01 0.73668070E-01-0.67363348E-04    3
 0.34308595E-07-0.71277784E-11-0.24340049E+05 0.26101370E+02                   4
c5oBqEqjC      11/20/07 c   5h   9o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.40521393E+02-0.31900214E-03-0.61855308E-08 0.64174875E-12-0.48531977E-16    2
-0.52406949E+05-0.17898970E+03 0.40966144E+01 0.69623753E-01-0.40500108E-04    3
 0.74398181E-08-0.46682330E-12-0.39222012E+05 0.20564930E+02                   4
c5e1qjE                 c   5h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17036451E+02 0.21085760E-01-0.59852791E-05 0.83724311E-09-0.47007516E-13    2
-0.23901621E+04-0.56846230E+02 0.17722903E+00 0.65953217E-01-0.47740246E-04    3
 0.16445126E-07-0.19152533E+01 0.24253323E+04 0.30887608E+02                   4
Cc5e1qE                 c   5h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16683964E+02 0.21253994E-01-0.60475973E-05 0.85203095E-09-0.48322159E-13    2
-0.39405137E+04-0.52895790E+02 0.19485227E+01 0.59933204E-01-0.41249863E-04    3
 0.13616687E-07-0.15544622E-11 0.29947342E+03 0.23936609E+02                   4
c5e1qEqjC               c   5h   9o   4    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23257355E+02 0.19122129E-01-0.50626313E-05 0.67521877E-09-0.36796324E-13    2
-0.16073713E+05-0.83020554E+02 0.19898301E+01 0.77482268E-01-0.60069353E-04    3
 0.20526699E-07-0.19769295E-11-0.10225527E+05 0.26901392E+02                   4
c5e1oEqC                c   5h   8o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.38424346E+01 0.44957586E-01-0.18295410E-04 0.33131282E-08-0.22313522E-12    2
-0.26065512E+05 0.22733135E+02 0.26205955E+01 0.64075150E-01-0.45573794E-04    3
```

```
 0.10795441E-07 0.16164129E-11-0.27548146E+05 0.22740942E+02                   4
isoph                   c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14510395E+02 0.17770655E-01-0.48361994E-05 0.65782796E-09-0.36320668E-13    2
 0.13614936E-05-0.49167549E+02-0.89688313E+00 0.60992021E-01-0.54763426E-04    3
 0.30580047E-07-0.78414688E-11 0.18134416E+05 0.30981623E+02                   4
isope                   c   5h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11847440E+02 0.21077490E-01-0.75629260E-05 0.13340700E-08-0.90289560E-13    2
 0.35829570E+04-0.37841320E+02-0.26532330E+01 0.69199530E-01-0.71369600E-04    3
 0.41371130E-07-0.99420400E-11 0.72526010E+04 0.35224370E+02                   4
isopy                   c   5h   70   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10834560E+02 0.20144030E-01-0.78064030E-05 0.14220630E-08-0.97821490E-13    2
 0.33047980E+05-0.28380240E+02 0.60308380E+01 0.13099690E-01 0.43335010E-04    3
-0.63177220E-07 0.25208120E-10 0.35415370E+05 0.14829280E+01                   4
! Base C6
c6h14                   c   6h  14o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.97784243E+01 0.43217782E-01-0.15517728E-04 0.25733407E-08-0.16292076E-12    2
-0.27251109E+05-0.26582550E+02-0.44697708E+00 0.66306598E-01-0.22811577E-04    3
-0.10950117E-07 0.77763932E-11-0.24345830E+05 0.27133120E+02                   4
Ac6h13                  c   6h  13o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13815425E+02 0.32867298E-01-0.10277109E-04 0.15470342E-08-0.91690083E-13    2
-0.22371562E+04-0.42272095E+02-0.60901982E+00 0.72525367E-01-0.47735059E-04    3
 0.14527513E-07-0.83027671E-12 0.17468357E+04 0.32297169E+02                   4
Bc6h13                  c   6h  13o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11430085E+02 0.36187179E-01-0.11691056E-04 0.18003208E-08-0.10833333E-12    2
-0.23825742E+04-0.28691025E+02 0.27041441E+00 0.67117505E-01-0.38187678E-04    3
 0.66859234E-08 0.17654475E-11 0.54798285E+03 0.28618254E+02                   4
Cc6h13                  c   6h  13o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11703730E+02 0.35654236E-01-0.11435824E-04 0.17511803E-08-0.10492785E-12    2
-0.24416934E+04-0.30103668E+02-0.82998407E+00 0.74897267E-01-0.55699576E-04    3
 0.22810807E-07-0.35824390E-11 0.65568329E+03 0.33214500E+02                   4
c6h12-1     Burcat      c   6h  12o   0    G  0200.00   6000.00  1000.00     1
 1.60616093E+01 2.75650562E-02-9.32973368E-06 1.49349013E-09-8.98810268E-14    2
-1.28042951E+04-5.69925586E+01 7.31509054E+00 3.71150329E-03 1.27250318E-04    3
-1.71556964E-07 6.89805935E-11-8.20916507E+03-5.94354365E-01-5.04539654E+03    4
c6h12-2                 c   6h  12    0    0G   200.000  6000.000 1000.      1
 1.22026584E+01 3.33112698E-02-1.19842937E-05 1.92997393E-09-1.15175007E-13    2
-1.24462369E+04-3.80004425E+01 5.32120633E+00 2.06273139E-02 7.37584289E-05    3
-1.08945044E-07 4.45825285E-11-9.02450060E+03 5.13145237E+00-6.06376082E+03    4
c6h12-3 Burcat    A03/05c   6h  12    0    0G   200.000  6000.000 1000.      1
 1.22026584E+01 3.33112698E-02-1.19842937E-05 1.92997393E-09-1.15175007E-13    2
-1.24462369E+04-3.80004425E+01 5.32120633E+00 2.06273139E-02 7.37584289E-05    3
-1.08945044E-07 4.45825285E-11-9.02450060E+03 5.13145237E+00-6.06376082E+03    4
Cc6h11-1   orme    ThERMc   6h  11    0    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 1.77336550E+01 2.48934775E-02-8.59991450E-06 1.34412828E-09-7.83475666E-14    2
 2.68017174E+03-6.93471508E+01-1.55544944E+00 6.76865602E-02-4.47048635E-05    3
 1.52236630E-08-2.14346377E-12 9.66316695E+03 3.51482658E+01                   4
Fc6h11-1   3/19/ 7 ThERMc   6h  11    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 1.74129892E+01 2.45984185E-02-8.37352752E-06 1.29588349E-09-7.50182758E-14    2
 1.08613574E+04-6.25724671E+01-6.17484828E-01 6.54674092E-02-4.36872486E-05    3
 1.51936842E-08-2.18414423E-12 1.72739396E+04 3.47490101E+01                   4
Ac6h11-3   7/ 9/ 7 ThERMc   6h  11    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 1.70133131E+01 2.50666461E-02-8.56223877E-06 1.32807194E-09-7.69999372E-14    2
 9.53859681E+03-5.96004483E+01-9.77623834E-01 6.56664597E-02-4.36212067E-05    3
 1.51941737E-08-2.20544154E-12 1.59778322E+04 3.76093517E+01                   4
Bc6h11-3  10/21/08 ThERGc   6h  11    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    41
 0.15668191E+02 0.24514601E-01-0.71116242E-05 0.10151393E-08-0.58044064E-13    2
 0.14436641E+04-0.55309387E+02 0.90552372E+00 0.58025889E-01-0.34862904E-04    3
 0.12531332E-07-0.25701258E-11 0.63244785E+04 0.23821157E+02                   4
c6h10-13 1,3-hexadien   c  6.h 10.   0.   0.G   200.000  6000.000 1000.      1
 1.22036500E+01 2.83718594E-02-1.01536016E-05 1.62760437E-09-9.68053329E-14    2
 9.92055464E+02-3.55142375E+01 4.33043903E+00 2.50924406E-02 5.32462166E-05    3
```

```
-8.82977395E-08 3.75813502E-11 4.31740800E+03 1.10070626E+01 7.03748507E+03    4
c6h10-15                c   6h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12656940E+02 0.28236120E-01-0.10406250E-04 0.18530920E-08-0.12592180E-12    2
 0.39164010E+04-0.38104860E+02-0.94988270E+00 0.60725200E-01-0.30414580E-04    3
-0.35837280E-08 0.64369670E-11 0.79947620E+04 0.33574390E+02                   4
c6h9                    c   6h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13160150E+02 0.25802720E-01-0.96709900E-05 0.17371230E-08-0.11866600E-12    2
 0.19108650E+05-0.40302510E+02-0.13852650E+01 0.63115940E-01-0.38862450E-04    3
 0.40612180E-08 0.39808990E-11 0.23327010E+05 0.35656570E+02                   4
c6h13qjA                c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19753206E+02 0.31011760E-01-0.92592463E-05 0.13480478E-08-0.78058104E-13    2
-0.21471141E+05-0.69945694E+02 0.36044836E+00 0.78703247E-01-0.43905231E-04    3
 0.37790731E-08 0.38456759E-11-0.15767968E+05 0.31854956E+02                   4
c6h13qjB                c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19821884E+02 0.31155419E-01-0.93553208E-05 0.13689923E-08-0.79624302E-13    2
-0.23856195E+05-0.70633621E+02 0.45876193E+01 0.51254179E-01 0.22703731E-04    3
-0.62104910E-07 0.26559822E-10-0.18817074E+05 0.12970772E+02                   4
c6h13qjC                c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19821884E+02 0.31155419E-01-0.93553208E-05 0.13689923E-08-0.79624302E-13    2
-0.23584523E+05-0.70634880E+02 0.46248960E+01 0.50997142E-01 0.23317216E-04    3
-0.62713475E-07 0.26773974E-10-0.18549344E+05 0.12811635E+02                   4
c6h13qA                 c   6h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19433508E+02 0.34405991E-01-0.11064304E-04 0.16987168E-08-0.10203481E-12    2
-0.39132656E+05-0.66697098E+02 0.10849909E+01 0.79399586E-01-0.45362638E-04    3
 0.77024351E-08 0.15291323E-11-0.33675320E+05 0.29796513E+02                   4
c6h13qB                 c   6h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.41775410E+02 0.28726826E-02-0.15001140E-06-0.23930398E-11 0.68109157E-15    2
-0.51207461E+05-0.19451601E+03 0.28131716E+01 0.71053639E-01-0.30026202E-04    3
-0.58243177E-09 0.12327464E-11-0.36478375E+05 0.21268078E+02                   4
c6h13qC                 c   6h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.41775410E+02 0.28726826E-02-0.15001140E-06-0.23930398E-11 0.68109157E-15    2
-0.50935723E+05-0.19451601E+03 0.28131716E+01 0.71053639E-01-0.30026202E-04    3
-0.58243177E-09 0.12327464E-11-0.36206637E+05 0.21268078E+02                   4
c6h13ojA                c   6h  13o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22329359E+02 0.23175325E-01-0.61261067E-05 0.81868035E-09-0.44813840E-13    2
-0.23050910E+05-0.88380127E+02-0.59955579E+00 0.74173234E-01-0.45430621E-04    3
 0.14013833E-07-0.20070159E-11-0.15425791E+05 0.34753712E+02                   4
c6h13ojB                c   6h  13o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.38293842E+02 0.21251040E-02-0.59026089E-07-0.80007511E-11 0.87491579E-15    2
-0.31134832E+05-0.18059302E+03 0.20236740E+00 0.70003942E-01-0.34522280E-04    3
 0.58372458E-08-0.11726545E-11-0.16721627E+05 0.30231340E+02                   4
c6h13ojC                c   6h  13o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.38301579E+02 0.21125542E-02-0.52249646E-07-0.95175309E-11 0.99386431E-15    2
-0.30866305E+05-0.18063777E+03 0.11000224E+00 0.70649818E-01-0.36084373E-04    3
 0.74040609E-08-0.17288450E-11-0.16440082E+05 0.30620359E+02                   4
c6h12rAqA               c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20216894E+02 0.29322056E-01-0.84620951E-05 0.12042758E-08-0.68764147E-13    2
-0.17401254E+05-0.68258171E+02 0.38184139E+00 0.87811686E-01-0.73620686E-04    3
 0.34176342E-07-0.65085381E-11-0.12046547E+05 0.33466438E+02                   4
c6h12rBqA               c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20263323E+02 0.29267546E-01-0.84374215E-05 0.11992916E-08-0.68393025E-13    2
-0.15553697E+05-0.68510544E+02 0.42829424E+00 0.87517455E-01-0.72691124E-04    3
 0.33060690E-07-0.60655335E-11-0.10191645E+05 0.33260738E+02                   4
c6h12rCqA               c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20263323E+02 0.29267546E-01-0.84374215E-05 0.11992916E-08-0.68393025E-13    2
-0.15553697E+05-0.68510544E+02 0.42829424E+00 0.87517455E-01-0.72691124E-04    3
 0.33060690E-07-0.60655335E-11-0.10191645E+05 0.33260738E+02                   4
c6h12rDqA               c   6h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20299438E+02 0.29202862E-01-0.83992354E-05 0.11902291E-08-0.67646613E-13    2
-0.15568283E+05-0.68712166E+02 0.55096954E+00 0.86672686E-01-0.70677124E-04    3
 0.31065145E-07-0.53641410E-11-0.10204858E+05 0.32740368E+02                   4
```

```
c6h12rEqA               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20061436E+02 0.29661173E-01-0.86050841E-05 0.12279292E-08-0.70171869E-13    2
-0.15521076E+05-0.67491661E+02 0.15400746E+01 0.79654016E-01-0.54967455E-04    3
 0.16715273E-07-0.63693804E-12-0.10300494E+05 0.28616970E+02                   4
c6h12rFqA               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20668734E+02 0.29152649E-01-0.84296089E-05 0.11991450E-08-0.68333360E-13    2
-0.14643715E+05-0.71053604E+02 0.66791296E+00 0.84893547E-01-0.63752275E-04    3
 0.23368550E-07-0.26373940E-11-0.91009941E+04 0.32280075E+02                   4
c6h12rAqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20733065E+02 0.29300919E-01-0.85266856E-05 0.12201634E-08-0.69899788E-13    2
-0.17378699E+05-0.71718170E+02 0.48903136E+01 0.57488881E-01 0.27231795E-05    3
-0.42358813E-07 0.20014471E-10-0.12502015E+05 0.13412024E+02                   4
c6h12rBqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19839386E+02 0.29738998E-01-0.86076680E-05 0.12256522E-08-0.69905351E-13    2
-0.20617703E+05-0.66807320E+02 0.53270664E+01 0.56259498E-01-0.53952147E-06    3
-0.36402486E-07 0.17601550E-10-0.16182274E+05 0.11010500E+02                   4
c6h12rCqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20394571E+02 0.29295260E-01-0.84629955E-05 0.12033156E-08-0.68559348E-13    2
-0.17962867E+05-0.69547142E+02 0.46455007E+01 0.60146067E-01-0.62904305E-05    3
-0.32594993E-07 0.16561400E-10-0.13239803E+05 0.14415103E+02                   4
c6h12rDqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20410440E+02 0.29267639E-01-0.84471085E-05 0.11996253E-08-0.68260576E-13    2
-0.17969363E+05-0.69635933E+02 0.46455007E+01 0.60146067E-01-0.62904305E-05    3
-0.32594993E-07 0.16561400E-10-0.13239806E+05 0.14415103E+02                   4
c6h12rEqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20124910E+02 0.29812712E-01-0.87051203E-05 0.12498642E-08-0.71828475E-13    2
-0.17903719E+05-0.68152168E+02 0.57306089E+01 0.52460566E-01 0.11022005E-04    3
-0.48544628E-07 0.21854518E-10-0.13345696E+05 0.98853025E+01                   4
c6h12rFqB               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20802357E+02 0.29176645E-01-0.84532348E-05 0.12027163E-08-0.68462021E-13    2
-0.17054236E+05-0.72104462E+02 0.50387607E+01 0.56455944E-01 0.52108185E-05    3
-0.44845862E-07 0.20895341E-10-0.12165589E+05 0.12783851E+02                   4
c6h12rAqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20802357E+02 0.29176645E-01-0.84532348E-05 0.12027163E-08-0.68462021E-13    2
-0.16782496E+05-0.72104462E+02 0.50387607E+01 0.56455944E-01 0.52108185E-05    3
-0.44845862E-07 0.20895341E-10-0.11893848E+05 0.12783851E+02                   4
c6h12rBqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20124910E+02 0.29812712E-01-0.87051203E-05 0.12498642E-08-0.71828475E-13    2
-0.17631977E+05-0.68152168E+02 0.57306089E+01 0.52460566E-01 0.11022005E-04    3
-0.48544628E-07 0.21854518E-10-0.13073955E+05 0.98853025E+01                   4
c6h12rCqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20038212E+02 0.29351102E-01-0.84435278E-05 0.11978675E-08-0.68197746E-13    2
-0.20377500E+05-0.67809563E+02 0.42751975E+01 0.63702032E-01-0.17240285E-04    3
-0.21087766E-07 0.12540457E-10-0.15808020E+05 0.15401323E+02                   4
c6h12rDqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20410440E+02 0.29267639E-01-0.84471085E-05 0.11996253E-08-0.68260576E-13    2
-0.17697623E+05-0.69635933E+02 0.46455007E+01 0.60146067E-01-0.62904305E-05    3
-0.32594993E-07 0.16561400E-10-0.12968065E+05 0.14415103E+02                   4
c6h12rEqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20124910E+02 0.29812712E-01-0.87051203E-05 0.12498642E-08-0.71828475E-13    2
-0.17631977E+05-0.68152168E+02 0.57306089E+01 0.52460566E-01 0.11022005E-04    3
-0.48544628E-07 0.21854518E-10-0.13073955E+05 0.98853025E+01                   4
c6h12rFqC               c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20802357E+02 0.29176645E-01-0.84532348E-05 0.12027163E-08-0.68462021E-13    2
-0.16782496E+05-0.72104462E+02 0.50387607E+01 0.56455944E-01 0.52108185E-05    3
-0.44845862E-07 0.20895341E-10-0.11893848E+05 0.12783851E+02                   4
c6h12qjAqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24744465E+02 0.29395320E-01-0.82680763E-05 0.11529977E-08-0.64818891E-13    2
-0.37138672E+05-0.90644157E+02 0.36157351E+01 0.69119684E-01 0.16569247E-05    3
-0.52811760E-07 0.25465340E-10-0.30795301E+05 0.22226788E+02                   4
c6h12qjBqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267891E+05-0.89850655E+02 0.66562986E+01 0.59124466E-01 0.16118238E-04    3
-0.61888827E-07 0.27660207E-10-0.29519117E+05 0.88861017E+01                   4
c6h12qjCqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267891E+05-0.89157524E+02 0.66562986E+01 0.59124466E-01 0.16118238E-04    3
-0.61888827E-07 0.27660207E-10-0.29519117E+05 0.95792303E+01                   4
c6h12qjDqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267703E+05-0.89156601E+02 0.65515065E+01 0.59843943E-01 0.14407220E-04    3
-0.60196534E-07 0.27066131E-10-0.29507795E+05 0.10024488E+02                   4
c6h12qjEqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35539500E+05-0.89155464E+02 0.65816431E+01 0.59639242E-01 0.14889595E-04    3
-0.60670047E-07 0.27231328E-10-0.29782828E+05 0.98975019E+01                   4
c6h12qjFqA              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24692474E+02 0.30324316E-01-0.87426452E-05 0.12425712E-08-0.70845951E-13    2
-0.33104664E+05-0.88470161E+02 0.22642877E+01 0.87695055E-01-0.53133310E-04    3
 0.65872112E-08 0.40425198E-11-0.26723791E+05 0.28472984E+02                   4
c6h12qjAqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267891E+05-0.89850647E+02 0.66562986E+01 0.59124466E-01 0.16118238E-04    3
-0.61888827E-07 0.27660207E-10-0.29519117E+05 0.88861094E+01                   4
c6h12qjBqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22551825E+02 0.34234878E-01-0.10444619E-04 0.15429422E-08-0.90169212E-13    2
-0.38529996E+05-0.80872627E+02 0.41035943E+01 0.64903609E-01 0.14941244E-04    3
-0.67188594E-07 0.31125876E-10-0.32938410E+05 0.18308067E+02                   4
c6h12qjCqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26256516E+02 0.28828666E-01-0.82070437E-05 0.11552400E-08-0.65400105E-13    2
-0.38394699E+05-0.98269279E+02 0.30956200E+00 0.10322275E+00-0.83217157E-04    3
 0.30472563E-07-0.28335743E-11-0.31417111E+05 0.34996494E+02                   4
c6h12qjDqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26331821E+02 0.28695367E-01-0.81290673E-05 0.11368473E-08-0.63891851E-13    2
-0.38424891E+05-0.98688553E+02 0.20904537E+00 0.10391913E+00-0.84887593E-04    3
 0.32137120E-07-0.34216217E-11-0.31406342E+05 0.35422707E+02                   4
c6h12qjEqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26256516E+02 0.28828666E-01-0.82070437E-05 0.11552400E-08-0.65400105E-13    2
-0.38666328E+05-0.98267281E+02 0.24997532E+00 0.10363517E+00-0.84204607E-04    3
 0.31454594E-07-0.31798524E-11-0.31682465E+05 0.35250637E+02                   4
c6h12qjFqB              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35539602E+05-0.89158104E+02 0.66412301E+01 0.59226818E-01 0.15877047E-04    3
-0.61652074E-07 0.27577607E-10-0.29789207E+05 0.96427183E+01                   4
c6h12qjAqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267863E+05-0.89850899E+02 0.66412301E+01 0.59226818E-01 0.15877047E-04    3
-0.61652074E-07 0.27577607E-10-0.29517467E+05 0.89499273E+01                   4
c6h12qjBqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26256516E+02 0.28828666E-01-0.82070437E-05 0.11552400E-08-0.65400105E-13    2
-0.38394586E+05-0.98267288E+02 0.24997532E+00 0.10363517E+00-0.84204607E-04    3
 0.31454594E-07-0.31798524E-11-0.31410725E+05 0.35250626E+02                   4
c6h12qjCqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22502577E+02 0.34321550E-01-0.10495176E-04 0.15548691E-08-0.91148531E-13    2
-0.38509656E+05-0.80596886E+02 0.39184082E+01 0.66178851E-01 0.11898082E-04    3
-0.64167260E-07 0.30061016E-10-0.32918453E+05 0.19093420E+02                   4
c6h12qjDqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26331821E+02 0.28695367E-01-0.81290673E-05 0.11368473E-08-0.63891851E-13    2
-0.38153148E+05-0.97995468E+02 0.20904537E+00 0.10391913E+00-0.84887593E-04    3
 0.32137120E-07-0.34216217E-11-0.31134600E+05 0.36115791E+02                   4
c6h12qjEqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26256516E+02 0.28828666E-01-0.82070437E-05 0.11552400E-08-0.65400105E-13    2
```

```
-0.38394586E+05-0.97574211E+02 0.24997532E+00 0.10363517E+00-0.84204607E-04    3
 0.31454594E-07-0.31798524E-11-0.31410725E+05 0.35943710E+02                   4
c6h12qjFqC              c   6h  13o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24884991E+02 0.30247923E-01-0.87102862E-05 0.12334272E-08-0.69960944E-13    2
-0.35267863E+05-0.89851097E+02 0.66412301E+01 0.59226818E-01 0.15877047E-04    3
-0.61652074E-07 0.27577607E-10-0.29517467E+05 0.89497280E+01                   4
c6h11oAqA               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.57412081E+01 0.74588828E-01-0.31377713E-04 0.58165845E-08-0.39831455E-12    2
-0.49849844E+05 0.76310661E+02-0.18944364E+01 0.91714382E-01-0.67452325E-04    3
 0.19914680E-07 0.49506991E-12-0.53937723E+05 0.45727139E+02                   4
c6h11oAqB               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.85530806E+01 0.51664196E-01-0.19869245E-04 0.34583445E-08-0.22650771E-12    2
-0.45950199E+05-0.20033569E+01 0.77481329E+00 0.85425608E-01-0.58006721E-04    3
 0.14003623E-07 0.13314028E-11-0.45288047E+05 0.33129765E+02                   4
c6h11oAqC               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49626327E+01 0.57184212E-01-0.22548358E-04 0.39930632E-08-0.26467337E-12    2
-0.45145672E+05 0.18565445E+02 0.17758968E+01 0.83694302E-01-0.59667931E-04    3
 0.17238401E-07 0.22502397E-12-0.46250062E+05 0.28090797E+02                   4
c6h11oAqD               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49626327E+01 0.57184212E-01-0.22548358E-04 0.39930632E-08-0.26467337E-12    2
-0.45145672E+05 0.18565445E+02 0.17758968E+01 0.83694302E-01-0.59667931E-04    3
 0.17238401E-07 0.22502397E-12-0.46250062E+05 0.28090797E+02                   4
c6h11oAqE               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49626327E+01 0.57184212E-01-0.22548358E-04 0.39930632E-08-0.26467337E-12    2
-0.45417414E+05 0.18565445E+02 0.17758968E+01 0.83694302E-01-0.59667931E-04    3
 0.17238401E-07 0.22502397E-12-0.46521805E+05 0.28090797E+02                   4
c6h11oAqF               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.88101683E+01 0.50143331E-01-0.18942672E-04 0.32562220E-08-0.21142803E-12    2
-0.44480547E+05-0.24171600E+01 0.23487110E+01 0.78779116E-01-0.51580759E-04    3
 0.12358462E-07 0.11055825E-11-0.43996586E+05 0.26536936E+02                   4
c6h11oBqA               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49432955E+01 0.56368947E-01-0.21999969E-04 0.38688066E-08-0.25522168E-12    2
-0.46057641E+05 0.18669518E+02 0.29456627E+01 0.76562606E-01-0.49144201E-04    3
 0.10688752E-07 0.18118817E-11-0.47227172E+05 0.23057047E+02                   4
c6h11oBqC               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.41605427E+02 0.18008725E-02-0.88728520E-07 0.38852762E-11-0.15619135E-15    2
-0.63566289E+05-0.18997246E+03 0.31409116E+01 0.69825500E-01-0.30687213E-04    3
-0.23923369E-09 0.12775472E-11-0.49109355E+05 0.22767229E+02                   4
c6h11oBqD               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.64458723E+01 0.54484427E-01-0.21149086E-04 0.37032699E-08-0.24347568E-12    2
-0.49428570E+05 0.96657867E+01 0.17020814E+01 0.81856683E-01-0.55555247E-04    3
 0.14247986E-07 0.93053473E-12-0.49773168E+05 0.28457155E+02                   4
c6h11oBqE               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.64458723E+01 0.54484427E-01-0.21149086E-04 0.37032699E-08-0.24347568E-12    2
-0.49700312E+05 0.96657867E+01 0.17020814E+01 0.81856683E-01-0.55555247E-04    3
 0.14247986E-07 0.93053473E-12-0.50044910E+05 0.28457155E+02                   4
c6h11oBqF               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10402470E+02 0.47308616E-01-0.17520646E-04 0.29696789E-08-0.19091231E-12    2
-0.48812727E+05-0.11946236E+02 0.20315180E+01 0.78644134E-01-0.51599589E-04    3
 0.13538892E-07 0.31729472E-12-0.47493828E+05 0.27932087E+02                   4
c6h11oCqA               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.26367302E+01 0.69385134E-01-0.28678889E-04 0.52499680E-08-0.35627073E-12    2
-0.43703914E+05 0.61137470E+02 0.17273275E+01 0.82049020E-01-0.57119454E-04    3
 0.14681574E-07 0.15254496E-11-0.47653969E+05 0.28933731E+02                   4
c6h11oCqB               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32680347E+01 0.71671180E-01-0.30105617E-04 0.55750569E-08-0.38150174E-12    2
-0.45044051E+05 0.63582588E+02 0.16080317E+00 0.88631846E-01-0.63355787E-04    3
 0.16095633E-07 0.18489784E-11-0.48946074E+05 0.35496952E+02                   4
c6h11oCqD               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32680347E+01 0.71671180E-01-0.30105617E-04 0.55750569E-08-0.38150174E-12    2
-0.45044047E+05 0.63582588E+02 0.16080317E+00 0.88631846E-01-0.63355787E-04    3
```

```
 0.16095633E-07 0.18489784E-11-0.48946070E+05 0.35496952E+02                   4
c6h11oCqE               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.68411160E+01 0.77310711E-01-0.32969230E-04 0.61701773E-08-0.42539480E-12    2
-0.44540859E+05 0.83985245E+02 0.12182808E+01 0.86526267E-01-0.64163592E-04    3
 0.18526839E-07 0.10096173E-11-0.50186078E+05 0.30216894E+02                   4
c6h11oCqF               c   6h  12o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.24538543E+01 0.69068864E-01-0.28517543E-04 0.52170095E-08-0.35389608E-12    2
-0.43774516E+05 0.60120399E+02 0.17135122E+01 0.82158916E-01-0.57425153E-04    3
 0.15034768E-07 0.13820448E-11-0.47652664E+05 0.28990437E+02                   4
c6h12o#3                c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14732866E+02 0.35259135E-01-0.12458770E-04 0.20448350E-08-0.12863717E-12    2
-0.28295033E+05-0.52044960E+02-0.66404366E+00 0.71003862E-01-0.30314273E-04    3
-0.81550722E-08 0.75825665E-11-0.23810916E+05 0.28968323E+02                   4
c6h12o#4                c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73783908E+01 0.50220411E-01-0.20271649E-04 0.36494578E-08-0.24472937E-12    2
-0.27495350E+05-0.13442131E+02-0.89441986E+01 0.11610021E+00-0.12974413E-03    3
 0.86496193E-07-0.23325111E-10-0.23717439E+05 0.66321281E+02                   4
c6h12o#5                c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15908834E+02 0.35655621E-01-0.12981614E-04 0.21760254E-08-0.13891338E-12    2
-0.39974477E+05-0.61963875E+02-0.45810523E+01 0.10196563E+00-0.92816917E-04    3
 0.43672976E-07-0.76752901E-11-0.34894789E+05 0.41234665E+02                   4
c6h12o-AB   Thergas         c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23473751E+02 0.20882014E-01-0.59693648E-05 0.84287177E-09-0.47821037E-13    2
-0.29703732E+05-0.98704185E+02-0.10034935E+01 0.72958566E-01-0.40384049E-04    3
 0.70684938E-08 0.53588899E-12-0.21466350E+05 0.33288284E+02                   4
c6h12o-BC   Thergas         c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20475368E+02 0.25986295E-01-0.81840717E-05 0.12359331E-08-0.73287100E-13    2
-0.30905229E+05-0.82932915E+02-0.13217347E+01 0.76108940E-01-0.44230786E-04    3
 0.77107325E-08 0.11580350E-11-0.24018838E+05 0.33070747E+02                   4
c6h12o-CD   Thergas         c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20475368E+02 0.25986295E-01-0.81840717E-05 0.12359331E-08-0.73287100E-13    2
-0.30633488E+05-0.84319077E+02-0.13217347E+01 0.76108940E-01-0.44230786E-04    3
 0.77107325E-08 0.11580350E-11-0.23747098E+05 0.31684586E+02                   4
c6h12o-AC   Thergas         c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73783908E+01 0.50220411E-01-0.20271649E-04 0.36494578E-08-0.24472937E-12    2
-0.27495350E+05-0.13442131E+02-0.89441986E+01 0.11610021E+00-0.12974413E-03    3
 0.86496193E-07-0.23325111E-10-0.23717439E+05 0.66321281E+02                   4
c6h12o-BD   Thergas         c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73783908E+01 0.50220411E-01-0.20271649E-04 0.36494578E-08-0.24472937E-12    2
-0.27495350E+05-0.13442131E+02-0.89441986E+01 0.11610021E+00-0.12974413E-03    3
 0.86496193E-07-0.23325111E-10-0.23717439E+05 0.66321281E+02                   4
c6h12o-BE               c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16735355E+02 0.92947297E-01-0.43382021E-04 0.86579748E-08-0.62545466E-12    2
-0.27097070E+05 0.11939847E+03-0.34234445E+01 0.93266614E-01-0.69902169E-04    3
 0.18419314E-07 0.22238203E-11-0.34738777E+05 0.36417698E+02                   4
c6h12o-AD               c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.12518517E+02 0.84613368E-01-0.38571245E-04 0.75679205E-08-0.53987869E-12    2
-0.25930486E+05 0.98745682E+02-0.31399417E+01 0.90367131E-01-0.66684144E-04    3
 0.18431253E-07 0.13608950E-11-0.31910967E+05 0.38167152E+02                   4
c6h12o-AE               c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.12518517E+02 0.84613368E-01-0.38571245E-04 0.75679205E-08-0.53987869E-12    2
-0.28919633E+05 0.96028275E+02-0.31399417E+01 0.90367131E-01-0.66684144E-04    3
 0.18431253E-07 0.13608950E-11-0.34900109E+05 0.35449753E+02                   4
c6oBrE                  c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.95019026E+01 0.37435893E-01-0.12632649E-04 0.20072826E-08-0.12348339E-12    2
-0.14910263E+05-0.13936760E+02 0.25571865E+00 0.72606862E-01-0.59779381E-04    3
 0.29099608E-07-0.59902860E-11-0.13133708E+05 0.30771936E+02                   4
c6oArD                  c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.85925674E+01 0.38959295E-01-0.13333538E-04 0.21381181E-08-0.13227344E-12    2
-0.10787228E+05-0.80679932E+01-0.70842373E+00 0.81803575E-01-0.80423291E-04    3
 0.47263374E-07-0.11715576E-10-0.95097783E+04 0.34735649E+02                   4
```

```
c6oCrF                  c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.19928465E+01 0.56852952E-01-0.22060156E-04 0.38633146E-08-0.25410208E-12    2
-0.92114756E+04 0.50608898E+02-0.10352753E+01 0.82059510E-01-0.76060234E-04    3
 0.38905025E-07-0.75072119E-11-0.12082103E+05 0.35920418E+02                   4
c6h12o#6                c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15219727E+02 0.36280558E-01-0.13197414E-04 0.22091879E-08-0.14081051E-12    2
-0.39687445E+05-0.58245026E+02-0.38727889E+01 0.95988669E-01-0.81817307E-04    3
 0.35464407E-07-0.54472186E-11-0.34828211E+05 0.38484776E+02                   4
nc6h13o2h               c   6h  14o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16627819E+02 0.39152514E-01-0.13238168E-04 0.21037099E-08-0.12927895E-12    2
-0.40344570E+05-0.51220245E+02 0.59706211E+01 0.46877615E-01 0.34982790E-04    3
-0.73755999E-07 0.30521620E-10-0.36788828E+05 0.81853294E+01                   4
c6h11o2h                c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16101555E+02 0.34520049E-01-0.11653715E-04 0.18512788E-08-0.11381252E-12    2
-0.26281617E+05-0.48384743E+02 0.68202605E+01 0.39484370E-01 0.33711967E-04    3
-0.65658682E-07 0.26421039E-10-0.23033857E+05 0.39506123E+01                   4
c5h11hco   2/29/96 thermc   6h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1384.000    51
 1.98891043e+01 2.71869340e-02-9.27391515e-06 1.43744158e-09-8.33090761e-14    2
-3.97523444e+04-7.60741671e+01 1.37517192e+00 6.65669689e-02-4.04423050e-05    3
 1.23836270e-08-1.52905857e-12-3.28740986e+04 2.48343934e+01                   4
c5h11co    2/29/96 thermc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1383.000    51
 1.94783812e+01 2.50466029e-02-8.54861346e-06 1.32557944e-09-7.68503296e-14    2
-2.07923937e+04-7.21995578e+01 2.14479069e+00 6.17863563e-02-3.74134690e-05    3
 1.13283795e-08-1.36917698e-12-1.43451172e+04 2.23128045e+01                   4
hexanone                c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12179505E+02 0.37140079E-01-0.13023840E-04 0.21249598E-08-0.13306825E-12    2
-0.39913273E+05-0.31854652E+02 0.37395129E+00 0.67965344E-01-0.38381633E-04    3
 0.68101591E-08 0.14946949E-11-0.36564609E+05 0.29580191E+02                   4
c6h7C                   c   6h  70   00    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14208190E+02 0.21154810E-01-0.79957600E-05 0.14457800E-08-0.99207360E-13    2
 0.21922070E+05-0.54276400E+02-0.59255600E+01 0.91190910E-01-0.10607460E-03    3
 0.66699450E-07-0.17176370E-10 0.26832750E+05 0.46324050E+02                   4
Lc6h7     1/ 7/ 6  ThERMc   6h   7o   0    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.16028887E+02 0.14730562E-01-0.39626420E-05 0.53470384E-09-0.29373927E-13    2
 0.42962898E+05-0.56601929E+02-0.21948254E+01 0.70474595E-01-0.64999811E-04    3
 0.29102454E-07-0.50760069E-11 0.47527703E+05 0.35796646E+02                   4
Lc6h6     1/ 7/ 6  ThERMc   6h   6o   0    0G   300.000  5000.000 1399.000    01
 0.14518873E+02 0.16073965E-01-0.54295829E-05 0.86245544E-09-0.52996307E-13    2
 0.35583297E+05-0.48749115E+02-0.52633297E+00 0.57947949E-01-0.42171916E-04    3
 0.96946726E-08 0.10167271E-11 0.39516957E+05 0.28465164E+02                   4
Lc6h4     1/ 7/ 6  ThERMc   6h   4o   0    0G   300.000  5000.000 1399.000    01
 0.14412430E+02 0.11626648E-01-0.40395416E-05 0.65525968E-09-0.40891962E-13    2
 0.57560609E+05-0.47552288E+02 0.84271616E+00 0.49124118E-01-0.36915586E-04    3
 0.87862908E-08 0.76802204E-12 0.61145730E+05 0.22211954E+02                   4
U-c6h5                  c   6h  50   00    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 1.72154000E+01 8.62106800E-03-8.22134000E-07-4.75216400E-10 8.84408600E-14    2
 6.40440300E+04-6.37727800E+01 4.85426800E+00 3.03165900E-02 1.74289200E-07    3
-1.81101000E-08 7.39251100E-12 6.81732300E+04 3.47340700E+00                   4
! Base C7
nc7h16                  c   7h  16o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11412502E+02 0.49421348E-01-0.17645974E-04 0.29154572E-08-0.18414220E-12    2
-0.28964750E+05-0.29627792E+02 0.33161920E+00 0.73365703E-01-0.21685577E-04    3
-0.16159765E-07 0.10064873E-10-0.25790506E+05 0.28787834E+02                   4
Ac7h15                  c   7h  15o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15940477E+02 0.38580772E-01-0.12203874E-04 0.18515277E-08-0.11029164E-12    2
-0.57763359E+04-0.51677505E+02-0.67567056E+00 0.83456106E-01-0.52650659E-04    3
 0.13893792E-07 0.54261093E-13-0.11590713E+04 0.34395603E+02                   4
Bc7h15                  c   7h  15o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13477986E+02 0.42041581E-01-0.13701534E-04 0.21241964E-08-0.12847954E-12    2
-0.58917695E+04-0.37668846E+02 0.24419750E+00 0.77775009E-01-0.42463380E-04    3
 0.54278266E-08 0.28667075E-11-0.23623591E+04 0.30544422E+02                   4
```

```
Cc7h15                  c   7h  15o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13756789E+02 0.41499116E-01-0.13440502E-04 0.20737412E-08-0.12497342E-12    2
-0.59530078E+04-0.39110367E+02-0.79508388E+00 0.85131802E-01-0.58961647E-04    3
 0.20543384E-07-0.21247923E-11-0.22612104E+04 0.34881710E+02                   4
Dc7h15                  c   7h  15o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13756789E+02 0.41499116E-01-0.13440502E-04 0.20737412E-08-0.12497342E-12    2
-0.59530078E+04-0.39803444E+02-0.79508388E+00 0.85131802E-01-0.58961647E-04    3
 0.20543384E-07-0.21247923E-11-0.22612104E+04 0.34188629E+02                   4
c7h14-1 Burcat    P 4/87c  7.h 14.   0.   0.G    200.000  6000.000 1000.       1
 2.00329343E+01 3.01875580E-02-9.96912897E-06 1.59376458E-09-9.64314031E-14    2
-1.70512608E+04-7.66778730E+01 8.70539860E+00 2.80074488E-03 1.55206000E-04    3
-2.09014025E-07 8.40505778E-11-1.12661494E+04-4.46493550E+00-7.54824999E+03    4
c7h14-2    2/10/95      c   7h  14    0    0g   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.06192047e+01 3.14852991e-02-1.07162057e-05 1.65827662e-09-9.59911785e-14    2
-1.96713162e+04-8.22519387e+01-1.16533279e+00 7.90439806e-02-4.96101666e-05    3
 1.58569009e-08-2.05346433e-12-1.17362359e+04 3.59871070e+01                   4
c7h14-3    2/10/95      c   7h  14    0    0g   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.06822750e+01 3.15388629e-02-1.07571215e-05 1.66690260e-09-9.65810393e-14    2
-1.96450604e+04-8.25235002e+01-2.03026994e+00 8.26324377e-02-5.45514471e-05    3
 1.87705822e-08-2.67571220e-12-1.15141029e+04 4.02316266e+01                   4
c7h12-13                c   7h  12o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17568600E+02 0.29500850E-01-0.96318160E-05 0.14941220E-08-0.90351970E-13    2
-0.39655290E+04-0.64368450E+02-0.14285510E+01 0.76632810E-01-0.45892160E-04    3
 0.77791240E-08 0.17312890E-11 0.16168500E+04 0.35307040E+02                   4
c7h12-16   1/23/ 8 ThERMc   7h  12    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 1.99811850E+01 2.73256602E-02-9.27589536E-06 1.43298085E-09-8.28566088E-14    2
-2.37987908E+03-7.73522025E+01-1.97047303E+00 7.90571540E-02-5.62070324E-05    3
 2.09665248E-08-3.22821096E-12 5.20521691E+03 4.03931518E+01                   4
Cc7h13-1   9/11/ 3       c   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.02038608e+01 2.93419067e-02-9.98810855e-06 1.54578179e-09-8.94871756e-14    2
 5.39375625e+03-7.64699376e+01-4.54324169e-01 7.47544837e-02-4.75103113e-05    3
 1.54448401e-08-2.04403706e-12 1.28849813e+04 3.55409723e+01                   4
Dc7h13-1   1/24/ 8 ThERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 2.05321062E+01 2.85988588E-02-9.64125534E-06 1.48314293E-09-8.55245930E-14    2
 5.35259833E+03-7.70635568E+01-3.37870973E-01 7.22549356E-02-4.22499105E-05    3
 1.14646497E-08-1.05306924E-12 1.30682289E+04 3.67608087E+01                   4
Ec7h13-1   1/24/ 8 ThERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 2.05321062E+01 2.85988588E-02-9.64125534E-06 1.48314293E-09-8.55245930E-14    2
 5.35259833E+03-7.70635568E+01-3.37870973E-01 7.22549356E-02-4.22499105E-05    3
 1.14646497E-08-1.05306924E-12 1.30682289E+04 3.67608087E+01                   4
Fc7h13-1   1/24/ 8 ThERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 2.05321062E+01 2.85988588E-02-9.64125534E-06 1.48314293E-09-8.55245930E-14    2
 5.35259833E+03-7.70635568E+01-3.37870973E-01 7.22549356E-02-4.22499105E-05    3
 1.14646497E-08-1.05306924E-12 1.30682289E+04 3.67608087E+01                   4
Dc7h13-2   Thergas      c   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.18532408E+02 0.29077549E-01-0.85321262E-05 0.12278411E-08-0.70590167E-13    2
-0.24075762E+04-0.68958923E+02 0.64706725E+00 0.70315212E-01-0.43204149E-04    3
 0.15585531E-07-0.31062438E-11 0.34339824E+04 0.26660000E+02                   4
Ec7h13-3   Thergas      c   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.18533449E+02 0.29151479E-01-0.85630554E-05 0.12320619E-08-0.70762826E-13    2
-0.24521562E+04-0.69827263E+02-0.54386389E+00 0.74583620E-01-0.47406600E-04    3
 0.16501390E-07-0.28516974E-11 0.35957886E+04 0.31549231E+02                   4
Ac7h13-3   1/24/ 8 ThERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.02595343E+01 2.94019199E-02-1.00312524E-05 1.55475333E-09-9.00969885E-14    2
 5.42336436E+03-7.56005591E+01-1.28816625E+00 7.82039641E-02-5.22552162E-05    3
 1.82427873E-08-2.64174309E-12 1.31025026E+04 4.07391378E+01                   4
c7h14rohAB   Thergas      c   7h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.20698971E+02 0.33696633E-01-0.98725559E-05 0.14190132E-08-0.81504024E-13    2
-0.26692963E+05-0.73146492E+02-0.16499925E+01 0.98895051E-01-0.85952001E-04    3
 0.45696478E-07-0.11122874E-10-0.20444488E+05 0.42077171E+02                   4
c7h14qjohAB  Thergas      c   7h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
 0.45896915E+02 0.58222981E-02-0.53322441E-06 0.25795534E-10-0.39857276E-15    2
-0.55414203E+05-0.21141504E+03 0.20359340E+01 0.89888103E-01-0.49061073E-04    3
 0.89672811E-08-0.62321161E-12-0.39520984E+05 0.28939226E+02                   4
c7h14rohBC   Thergas      c   7h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.41978401E+02 0.43258904E-02-0.33152264E-06 0.15963855E-10-0.41641889E-15    2
-0.38399004E+05-0.19519594E+03 0.75597651E-01 0.90568408E-01-0.70665265E-04    3
 0.37465313E-07-0.11440053E-10-0.23247287E+05 0.33559525E+02                   4
c7h14qjohBC  Thergas      c   7h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.11544290E+02 0.57450172E-01-0.20549713E-04 0.33994223E-08-0.21489031E-12    2
-0.43327180E+05-0.16956802E+02-0.10065804E+01 0.10877351E+00-0.80857884E-04    3
 0.25605592E-07-0.92462117E-12-0.41744852E+05 0.41347656E+02                   4
c7h14rohCD   Thergas      c   7h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.41948868E+02 0.43795775E-02-0.36361692E-06 0.23646168E-10-0.10534741E-14    2
-0.38115375E+05-0.19503119E+03-0.88206828E-01 0.91700561E-01-0.73374889E-04    3
 0.40160277E-07-0.12390547E-10-0.22957961E+05 0.34253792E+02                   4
c7h14qjohCD  Thergas      c   7h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.11688043E+02 0.57216343E-01-0.20442554E-04 0.33795984E-08-0.21357915E-12    2
-0.43113105E+05-0.17762909E+02-0.10589626E+01 0.10915942E+00-0.81844075E-04    3
 0.26651257E-07-0.13164128E-11-0.41467816E+05 0.41566452E+02                   4
c7h15qjA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23393402E+02 0.34374800E-01-0.10174252E-04 0.14722351E-08-0.84904421E-13    2
-0.25646074E+05-0.87955254E+02-0.28062588E+00 0.93979754E-01-0.60533286E-04    3
 0.16474052E-07-0.67128237E-12-0.18621359E+05 0.36299694E+02                   4
c7h15qjB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44921665E+02 0.45169112E-02-0.34210328E-06 0.12650016E-10-0.23423748E-16    2
-0.37440883E+05-0.21136102E+03 0.13364522E+01 0.86409330E-01-0.47067962E-04    3
 0.10061470E-07-0.16309480E-11-0.21412611E+05 0.28243620E+02                   4
c7h15qjC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44911877E+02 0.45366995E-02-0.35486769E-06 0.15824706E-10-0.29365086E-15    2
-0.37165984E+05-0.21130963E+03 0.14680889E+01 0.85499540E-01-0.44888893E-04    3
 0.78900690E-08-0.86276076E-12-0.21155010E+05 0.27684477E+02                   4
c7h15qjD  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44911877E+02 0.45366995E-02-0.35486769E-06 0.15824706E-10-0.29365086E-15    2
-0.37166145E+05-0.21200342E+03 0.15578123E+01 0.84882416E-01-0.43419066E-04    3
 0.64345356E-08-0.35128465E-12-0.21164686E+05 0.26610418E+02                   4
c7h14rAqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23944513E+02 0.32530412E-01-0.92864402E-05 0.13066292E-08-0.73777417E-13    2
-0.21611477E+05-0.86755051E+02-0.26428804E+00 0.10312117E+00-0.90321941E-04    3
 0.46938350E-07-0.11047218E-10-0.14899463E+05 0.37933216E+02                   4
c7h14rBqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23888094E+02 0.32660786E-01-0.93713870E-05 0.13277813E-08-0.75567882E-13    2
-0.19723086E+05-0.86435310E+02-0.19996403E+00 0.10270103E+00-0.89086010E-04    3
 0.45513747E-07-0.10494014E-10-0.13046411E+05 0.37652130E+02                   4
c7h14rCqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23888094E+02 0.32660786E-01-0.93713870E-05 0.13277813E-08-0.75567882E-13    2
-0.19723086E+05-0.86435310E+02-0.19996403E+00 0.10270103E+00-0.89086010E-04    3
 0.45513747E-07-0.10494014E-10-0.13046411E+05 0.37652130E+02                   4
c7h14rDqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23888094E+02 0.32660786E-01-0.93713870E-05 0.13277813E-08-0.75567882E-13    2
-0.19723086E+05-0.86435310E+02-0.19996403E+00 0.10270103E+00-0.89086010E-04    3
 0.45513747E-07-0.10494014E-10-0.13046411E+05 0.37652130E+02                   4
c7h14rEqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23888094E+02 0.32660786E-01-0.93713870E-05 0.13277813E-08-0.75567882E-13    2
-0.19723086E+05-0.86435310E+02-0.19996403E+00 0.10270103E+00-0.89086010E-04    3
 0.45513747E-07-0.10494014E-10-0.13046411E+05 0.37652130E+02                   4
c7h14rFqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23615696E+02 0.33179350E-01-0.96121621E-05 0.13737135E-08-0.78769043E-13    2
-0.19661877E+05-0.85022552E+02 0.78662324E+00 0.95704161E-01-0.73440278E-04    3
 0.31238994E-07-0.57970490E-11-0.13141836E+05 0.33538815E+02                   4
c7h14rGqA  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.24310860E+02 0.32514811E-01-0.93451663E-05 0.13232798E-08-0.75150904E-13    2
```

```
-0.18819742E+05-0.89074661E+02-0.37047751E-01 0.10061781E+00-0.81466394E-04    3
 0.37156521E-07-0.75437582E-11-0.11947512E+05 0.36995075E+02                   4
c7h14rAqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45190552E+02 0.39249966E-02-0.26945162E-06 0.10540411E-10-0.15673087E-15    2
-0.30734975E+05-0.20893950E+03 0.16332978E+01 0.92683263E-01-0.67139903E-04    3
 0.29896846E-07-0.82075692E-11-0.15096797E+05 0.28710058E+02                   4
c7h14rBqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44392441E+02 0.41862428E-02-0.25222701E-06-0.11902487E-11 0.95383332E-15    2
-0.34010000E+05-0.20455539E+03 0.20146108E+01 0.91834389E-01-0.71306851E-04    3
 0.36746279E-07-0.10933351E-10-0.18771375E+05 0.26543888E+02                   4
c7h14rCqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44805279E+02 0.40119044E-02-0.26433668E-06 0.70999157E-11 0.16614752E-15    2
-0.31302529E+05-0.20651306E+03 0.14362786E+01 0.95005780E-01-0.75341442E-04    3
 0.38841929E-07-0.11368077E-10-0.15839826E+05 0.29511168E+02                   4
c7h14rDqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44805279E+02 0.40119044E-02-0.26433668E-06 0.70999157E-11 0.16614752E-15    2
-0.31302529E+05-0.20651306E+03 0.14362786E+01 0.95005780E-01-0.75341442E-04    3
 0.38841929E-07-0.11368077E-10-0.15839826E+05 0.29511168E+02                   4
c7h14rEqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44805279E+02 0.40119044E-02-0.26433668E-06 0.70999157E-11 0.16614752E-15    2
-0.31302529E+05-0.20651306E+03 0.14362786E+01 0.95005780E-01-0.75341442E-04    3
 0.38841929E-07-0.11368077E-10-0.15839826E+05 0.29511168E+02                   4
c7h14rFqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44682278E+02 0.42416449E-02-0.33470030E-06 0.20407849E-10-0.86585259E-15    2
-0.31295688E+05-0.20591916E+03 0.25851307E+01 0.86880840E-01-0.56979061E-04    3
 0.21848990E-07-0.57071249E-11-0.15952580E+05 0.24711012E+02                   4
c7h14rGqB  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45190552E+02 0.39249966E-02-0.26945162E-06 0.10540411E-10-0.15673087E-15    2
-0.30382717E+05-0.20893950E+03 0.16332978E+01 0.92683263E-01-0.67139903E-04    3
 0.29896846E-07-0.82075692E-11-0.14744538E+05 0.28710058E+02                   4
c7h14rAqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45181408E+02 0.39412803E-02-0.27884789E-06 0.12650853E-10-0.32101961E-15    2
-0.30107604E+05-0.20888928E+03 0.17774829E+01 0.91677897E-01-0.64711348E-04    3
 0.27458762E-07-0.73396367E-11-0.14488153E+05 0.28100180E+02                   4
c7h14rBqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44775665E+02 0.40761526E-02-0.23768885E-06-0.25779721E-11 0.10269779E-14    2
-0.31061422E+05-0.20643967E+03 0.24893067E+01 0.87553196E-01-0.58610600E-04    3
 0.23489630E-07-0.62904595E-11-0.15670702E+05 0.25115705E+02                   4
c7h14rCqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44435394E+02 0.41029528E-02-0.26996420E-06 0.67037964E-11 0.22165611E-15    2
-0.33714309E+05-0.20470654E+03 0.11001769E+01 0.98336764E-01-0.85778898E-04    3
 0.49861015E-07-0.15222672E-10-0.18412018E+05 0.30350811E+02                   4
c7h14rDqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44839077E+02 0.39527244E-02-0.22995101E-06-0.10338390E-11 0.83561828E-15    2
-0.31044543E+05-0.20670189E+03 0.13982633E+01 0.95270954E-01-0.75980410E-04    3
 0.39478863E-07-0.11592266E-10-0.15564044E+05 0.29671926E+02                   4
c7h14rEqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44839077E+02 0.39527244E-02-0.22995101E-06-0.10338390E-11 0.83561828E-15    2
-0.31044543E+05-0.20670189E+03 0.13982633E+01 0.95270954E-01-0.75980410E-04    3
 0.39478863E-07-0.11592266E-10-0.15564044E+05 0.29671926E+02                   4
c7h14rFqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.44775665E+02 0.40761526E-02-0.23768885E-06-0.25779721E-11 0.10269779E-14    2
-0.31061422E+05-0.20643967E+03 0.24893067E+01 0.87553196E-01-0.58610600E-04    3
 0.23489630E-07-0.62904595E-11-0.15670702E+05 0.25115705E+02                   4
c7h14rGqC  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45181408E+02 0.39412803E-02-0.27884789E-06 0.12650853E-10-0.32101961E-15    2
-0.30107604E+05-0.20888928E+03 0.17774829E+01 0.91677897E-01-0.64711348E-04    3
 0.27458762E-07-0.73396367E-11-0.14488153E+05 0.28100180E+02                   4
c7h14rAqD  Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.45181408E+02 0.39412803E-02-0.27884789E-06 0.12650853E-10-0.32101961E-15    2
-0.30107604E+05-0.20888928E+03 0.17774829E+01 0.91677897E-01-0.64711348E-04    3
```

```
 0.27458762E-07-0.73396367E-11-0.14488153E+05 0.28100176E+02                4
c7h14rBqD Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.44775665E+02 0.40761526E-02-0.23768885E-06-0.25779721E-11 0.10269779E-14    2
-0.31061422E+05-0.20643967E+03 0.24893067E+01 0.87553196E-01-0.58610600E-04    3
 0.23489630E-07-0.62904595E-11-0.15670702E+05 0.25115705E+02                4
c7h14rCqD Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.44839077E+02 0.39527244E-02-0.22995101E-06-0.10338390E-11 0.83561828E-15    2
-0.31044543E+05-0.20670189E+03 0.13982633E+01 0.95270954E-01-0.75980410E-04    3
 0.39478863E-07-0.11592266E-10-0.15564044E+05 0.29671926E+02                4
c7h14rDqD Thergas       c   7h  15o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.44435394E+02 0.41029528E-02-0.26996420E-06 0.67037964E-11 0.22165611E-15    2
-0.33714309E+05-0.20539963E+03 0.11001769E+01 0.98336764E-01-0.85778898E-04    3
 0.49861015E-07-0.15222672E-10-0.18412018E+05 0.29657728E+02                4
c7h14qjAqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.46919720E+02 0.69132228E-02-0.71517195E-06 0.41780759E-10-0.10687115E-14    2
-0.49448781E+05-0.21467535E+03 0.55063897E+00 0.10289227E+00-0.64516542E-04    3
 0.15435059E-07-0.12050456E-11-0.33409629E+05 0.36722435E+02                4
c7h14qjBqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22361865E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089297E+05 0.25159073E+02                4
c7h14qjCqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22361873E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089297E+05 0.25158997E+02                4
c7h14qjDqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22361858E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089297E+05 0.25159142E+02                4
c7h14qjEqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330973E+05-0.22361868E+03 0.32939990E+01 0.95046610E-01-0.55489734E-04    3
 0.12108363E-07-0.11792883E-11-0.32102691E+05 0.24629757E+02                4
c7h14qjFqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48602574E+05-0.22361700E+03 0.32193439E+01 0.95561385E-01-0.56718371E-04    3
 0.13327141E-07-0.16081653E-11-0.32366402E+05 0.24947639E+02                4
c7h14qjGqA Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26975155E+02 0.35778895E-01-0.10531483E-04 0.15184778E-08-0.87387000E-13    2
-0.36712527E+05-0.98112724E+02 0.15888191E+01 0.10321960E+00-0.70382222E-04    3
 0.19927683E-07-0.71221929E-12-0.29573631E+05 0.33754341E+02                4
c7h14qjAqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22292549E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089297E+05 0.25852232E+02                4
c7h14qjBqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45227947E+02 0.10077283E-01-0.14244521E-05 0.11222289E-09-0.39730771E-14    2
-0.50915621E+05-0.20731842E+03 0.43764430E+00 0.10315953E+00-0.62971063E-04    3
 0.13940753E-07-0.58307591E-12-0.35492223E+05 0.35308372E+02                4
c7h14qjCqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.36094477E+05-0.27464142E+02 0.37933916E+00 0.11296361E+00-0.84711312E-04    3
 0.25885498E-07-0.35842984E-12-0.34339266E+05 0.36506748E+02                4
c7h14qjDqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.36094527E+05-0.26771049E+02 0.40947607E+00 0.11275890E+00-0.84228937E-04    3
 0.25411993E-07-0.19323120E-12-0.34342559E+05 0.37071712E+02                4
c7h14qjEqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.36094527E+05-0.26770576E+02 0.40947607E+00 0.11275890E+00-0.84228937E-04    3
 0.25411993E-07-0.19323120E-12-0.34342559E+05 0.37072186E+02                4
c7h14qjFqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13927637E+02 0.57605498E-01-0.20497164E-04 0.33773853E-08-0.21286956E-12    2
-0.36287090E+05-0.25669113E+02 0.33987576E+00 0.11322224E+00-0.85289197E-04    3
 0.26414055E-07-0.52749141E-12-0.34606598E+05 0.37370857E+02                4
c7h14qjGqB Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48602449E+05-0.22361919E+03 0.31387708E+01 0.96118048E-01-0.58051151E-04    3
 0.14653637E-07-0.20764412E-11-0.32357742E+05 0.25286674E+02                4
c7h14qjAqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330762E+05-0.22292581E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089299E+05 0.25851910E+02                4
c7h14qjBqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.36094582E+05-0.26769402E+02 0.43961298E+00 0.11255420E+00-0.83746556E-04    3
 0.24938485E-07-0.28032574E-13-0.34345852E+05 0.36945232E+02                4
c7h14qjCqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45227947E+02 0.10077283E-01-0.14244521E-05 0.11222289E-09-0.39730771E-14    2
-0.50915602E+05-0.20662555E+03 0.42257586E+00 0.10326187E+00-0.63212254E-04    3
 0.14177506E-07-0.66567514E-12-0.35490574E+05 0.36065315E+02                4
c7h14qjDqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.35822785E+05-0.27464134E+02 0.40947607E+00 0.11275890E+00-0.84228937E-04    3
 0.25411993E-07-0.19323120E-12-0.34070816E+05 0.36378628E+02                4
c7h14qjEqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.35822785E+05-0.27463646E+02 0.40947607E+00 0.11275890E+00-0.84228937E-04    3
 0.25411993E-07-0.19323120E-12-0.34070816E+05 0.36379120E+02                4
c7h14qjFqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13927637E+02 0.57605498E-01-0.20497164E-04 0.33773853E-08-0.21286956E-12    2
-0.36015348E+05-0.26362198E+02 0.33987576E+00 0.11322224E+00-0.85289197E-04    3
 0.26414055E-07-0.52749141E-12-0.34334859E+05 0.36677765E+02                4
c7h14qjGqC Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330711E+05-0.22292604E+03 0.31387708E+01 0.96118048E-01-0.58051151E-04    3
 0.14653637E-07-0.20764412E-11-0.32086002E+05 0.25979818E+02                4
c7h14qjAqD Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22361911E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089297E+05 0.25158613E+02                4
c7h14qjBqD Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.36094582E+05-0.26769402E+02 0.43961298E+00 0.11255420E+00-0.83746556E-04    3
 0.24938485E-07-0.28032574E-13-0.34345852E+05 0.36945232E+02                4
c7h14qjCqD Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14123916E+02 0.57279505E-01-0.20336662E-04 0.33450687E-08-0.21053912E-12    2
-0.35822785E+05-0.26770576E+02 0.40947607E+00 0.11275890E+00-0.84228937E-04    3
 0.25411993E-07-0.19323120E-12-0.34070816E+05 0.37072186E+02                4
c7h14qjDqD Thergas      c   7h  15o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45227947E+02 0.10077283E-01-0.14244521E-05 0.11222289E-09-0.39730771E-14    2
-0.50915602E+05-0.20731870E+03 0.42257586E+00 0.10326187E+00-0.63212254E-04    3
 0.14177506E-07-0.66567514E-12-0.35490574E+05 0.35372154E+02                4
c7h14o#3                c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16806377E+02 0.41090086E-01-0.14442586E-04 0.23592170E-08-0.14779973E-12    2
-0.32099486E+05-0.59844536E+02-0.94757181E+00 0.83270840E-01-0.38094015E-04    3
-0.62292478E-08 0.76657543E-11-0.26967699E+05 0.33349785E+02                4
c7h14o#4                c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.90986776E+01 0.56584548E-01-0.22478689E-04 0.40028287E-08-0.26642490E-12    2
-0.30604881E+05-0.22008934E+02-0.90264168E+01 0.12696323E+00-0.13411828E-03    3
 0.84973180E-07-0.21997879E-10-0.26352227E+05 0.67078644E+02                4
c7h14o#5                c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.18016979E+02 0.41417211E-01-0.14918418E-04 0.24784068E-08-0.15705009E-12    2
-0.43248656E+05-0.69954178E+02-0.46336904E+01 0.11263376E+00-0.96761600E-04    3
 0.41775536E-07-0.62402917E-11-0.37532832E+05 0.44637928E+02                4
c7h14o#6                c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18053444E+02 0.41352723E-01-0.14880672E-04 0.24694922E-08-0.15631805E-12    2
-0.45980504E+05-0.72874283E+02-0.48092661E+01 0.11384974E+00-0.99678691E-04    3
 0.44683308E-07-0.72679709E-11-0.40231418E+05 0.42664360E+02                4
c7h14o-AB  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.25317547E+02 0.27014595E-01-0.80344398E-05 0.11650484E-08-0.67199447E-13    2
-0.33132359E+05-0.10656684E+03-0.12610518E+01 0.85094646E-01-0.47995236E-04    3
 0.89957570E-08 0.55070678E-12-0.24354779E+05 0.36167255E+02                4
c7h14o-AC  2/10/95      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000    41
 2.33840162e+01 3.26747680e-02-1.12496957e-05 1.75424237e-09-1.02088356e-13    2
-3.35320676e+04-9.93857329e+01-6.65407598e+00 1.06857688e-01-8.28600373e-05    3
 3.37794034e-08-5.65586099e-12-2.34614627e+04 6.05805871e+01                4
c7h14o-AD  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10861847E+02 0.90801008E-01-0.40454895E-04 0.78092146E-08-0.55053195E-12    2
-0.29241203E+05 0.92055550E+02-0.35963786E+01 0.10388426E+00-0.77614015E-04    3
 0.23669205E-07 0.20558646E-12-0.34778145E+05 0.41888092E+02                4
c7h14o-AE  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10861847E+02 0.90801008E-01-0.40454895E-04 0.78092146E-08-0.55053195E-12    2
-0.31958609E+05 0.89338150E+02-0.35963786E+01 0.10388426E+00-0.77614015E-04    3
 0.23669205E-07 0.20558646E-12-0.37495551E+05 0.39170692E+02                4
c7h14o-BC  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.22146355E+02 0.32465883E-01-0.10475869E-04 0.16118943E-08-0.96946343E-13    2
-0.34271602E+05-0.89852501E+02-0.15398868E+01 0.87977059E-01-0.51212352E-04    3
 0.90239594E-08 0.13851446E-11-0.26911557E+05 0.35782116E+02                4
c7h14o-BD  2/10/95      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1400.000    41
 2.39263696e+01 3.19760128e-02-1.09563797e-05 1.70304471e-09-9.88892529e-14    2
-3.57770124e+04-1.02450761e+02-6.14247505e+00 1.06851133e-01-8.34772177e-05    3
 3.40576579e-08-5.66867936e-12-2.58080917e+04 5.73755835e+01                4
c7h14o-BE  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.14940094E+02 0.98773286E-01-0.44981825E-04 0.88201961E-08-0.62896059E-12    2
-0.30170373E+05 0.11338042E+03-0.36267824E+01 0.10504738E+00-0.76716671E-04    3
 0.19612241E-07 0.24764450E-11-0.37361543E+05 0.40450455E+02                4
c7h14o-BF  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.14940094E+02 0.98773286E-01-0.44981825E-04 0.88201961E-08-0.62896059E-12    2
-0.33159516E+05 0.11066302E+03-0.36267824E+01 0.10504738E+00-0.76716671E-04    3
 0.19612241E-07 0.24764450E-11-0.40350684E+05 0.37733055E+02                4
c7h14o-CD  Thergas      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.22146355E+02 0.32465883E-01-0.10475869E-04 0.16118943E-08-0.96946343E-13    2
-0.33999863E+05-0.89852501E+02-0.15398868E+01 0.87977059E-01-0.51212352E-04    3
 0.90239594E-08 0.13851446E-11-0.26639816E+05 0.35782116E+02                4
c7h14o-CE  2/10/95      c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1400.000    41
 2.39263696e+01 3.19760128e-02-1.09563797e-05 1.70304471e-09-9.88892529e-14    2
-3.57770124e+04-1.02450761e+02-6.14247505e+00 1.06851133e-01-8.34772177e-05    3
 3.40576579e-08-5.66867936e-12-2.58080917e+04 5.73755835e+01                4
nc7h15o2h               c   7h  16o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18558531E+02 0.45223482E-01-0.15356611E-04 0.24489846E-08-0.15092975E-12    2
-0.43816480E+05-0.59602539E+02 0.60635042E+01 0.56569051E-01 0.33279488E-04    3
-0.77762287E-07 0.32654605E-10-0.39714562E+05 0.95821352E+01                4
c7h13o2h                c   7h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18109594E+02 0.40456213E-01-0.13694291E-04 0.21783972E-08-0.13398931E-12    2
-0.29785172E+05-0.57199608E+02 0.68900800E+01 0.49336571E-01 0.31621406E-04    3
-0.69279082E-07 0.28418179E-10-0.25957135E+05 0.54449635E+01                4
c7h13oAqA  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.41199965E+01 0.81059322E-01-0.33583805E-04 0.61593375E-08-0.41859853E-12    2
-0.53183094E+05 0.69710876E+02-0.20290637E+01 0.10299427E+00-0.72993702E-04    3
 0.19758369E-07 0.12546486E-11-0.56839277E+05 0.48085903E+02                4
c7h13oAqB  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10055791E+02 0.58433264E-01-0.22306607E-04 0.38629016E-08-0.25212970E-12    2
```

```
-0.49251434E+05-0.79864883E+01 0.58466530E+00 0.97080760E-01-0.64426204E-04    3
 0.14702011E-07 0.17956256E-11-0.48183516E+05 0.35725052E+02                4
c7h13oAqC  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.68146224E+01 0.63339196E-01-0.24655281E-04 0.43262518E-08-0.28487976E-12    2
-0.48582660E+05 0.10640205E+02 0.17573360E+01 0.94195053E-01-0.63410480E-04    3
 0.15365915E-07 0.15628359E-11-0.49164363E+05 0.29954626E+02                4
c7h13oAqD  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.68146224E+01 0.63339196E-01-0.24655281E-04 0.43262518E-08-0.28487976E-12    2
-0.48582660E+05 0.10640205E+02 0.17573360E+01 0.94195053E-01-0.63410480E-04    3
 0.15365915E-07 0.15628359E-11-0.49164363E+05 0.29954626E+02                4
c7h13oAqE  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.68146224E+01 0.63339196E-01-0.24655281E-04 0.43262518E-08-0.28487976E-12    2
-0.48582660E+05 0.10640205E+02 0.17573360E+01 0.94195053E-01-0.63410480E-04    3
 0.15365915E-07 0.15628359E-11-0.49164363E+05 0.29954626E+02                4
c7h13oAqF  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65449371E+01 0.63804850E-01-0.24902043E-04 0.43793089E-08-0.28891559E-12    2
-0.48747801E+05 0.12144302E+02 0.17039071E+01 0.94535515E-01-0.64148109E-04    3
 0.16018999E-07 0.13609833E-11-0.49429984E+05 0.30184950E+02                4
c7h13oAqG  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10746850E+02 0.56194447E-01-0.21036287E-04 0.35940380E-08-0.23241703E-12    2
-0.47955117E+05-0.10830147E+02 0.20587246E+01 0.91177449E-01-0.59923517E-04    3
 0.15124380E-07 0.78439382E-12-0.46882031E+05 0.29548262E+02                4
c7h13oBqA  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.67901912E+01 0.62539011E-01-0.24117238E-04 0.42043031E-08-0.27558980E-12    2
-0.49493656E+05 0.10770271E+02 0.26199572E+01 0.89184307E-01-0.57956753E-04    3
 0.13851823E-07 0.13762410E-11-0.50108477E+05 0.26222891E+02                4
c7h13oBqC  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45489555E+02 0.44077593E-02-0.39101283E-06 0.21313550E-10-0.60355910E-15    2
-0.67786656E+05-0.20918715E+03 0.29112494E+01 0.81857376E-01-0.38328377E-04    3
 0.20593687E-08 0.10240022E-11-0.52001805E+05 0.25516926E+02                4
c7h13oBqD  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.52835156E+05 0.21772842E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52673648E+05 0.30867115E+02                4
c7h13oBqE  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.52835156E+05 0.21772842E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52673648E+05 0.30867115E+02                4
c7h13oBqF  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.53106895E+05 0.21772842E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52945387E+05 0.30867115E+02                4
c7h13oBqG  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12047176E+02 0.53854626E-01-0.19862749E-04 0.33578831E-08-0.21552881E-12    2
-0.52172117E+05-0.18729332E+02 0.17982396E+01 0.90619296E-01-0.58842757E-04    3
 0.15116978E-07 0.44950821E-12-0.50384961E+05 0.30707191E+02                4
c7h13oCqA  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.82995027E+00 0.75562038E-01-0.30756626E-04 0.55703624E-08-0.37517193E-12    2
-0.47112914E+05 0.53493481E+02 0.13843561E+01 0.94782956E-01-0.66182307E-04    3
 0.18075669E-07 0.10142453E-11-0.50533328E+05 0.32173725E+02                4
c7h13oCqB  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14205081E+01 0.77749796E-01-0.32102991E-04 0.58728529E-08-0.39836873E-12    2
-0.48465938E+05 0.55723015E+02-0.35512835E+00 0.10256925E+00-0.75315525E-04    3
 0.22383103E-07 0.31442882E-12-0.51806988E+05 0.39468834E+02                4
c7h13oCqD  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13408147E+01 0.77609472E-01-0.32024709E-04 0.58552172E-08-0.39697613E-12    2
-0.48497754E+05 0.55278328E+02-0.15882219E+00 0.10120784E+00-0.72047580E-04    3
 0.19125622E-07 0.14651040E-11-0.51827992E+05 0.38637489E+02                4
c7h13oCqE  Thergas      c   7h  14o   3    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51406007E+01 0.83614781E-01-0.35064513E-04 0.64851395E-08-0.44334276E-12    2
-0.47628621E+05 0.76958145E+02 0.93298864E+00 0.98839752E-01-0.72162977E-04    3
```

```
 0.20804139E-07 0.91319563E-12-0.52799598E+05 0.33215393E+02                4
c7h13oCqF  Thergas       c   7h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51406007E+01 0.83614781E-01-0.35064513E-04 0.64851395E-08-0.44334276E-12    2
-0.47900359E+05 0.76958145E+02 0.93298864E+00 0.98839752E-01-0.72162977E-04    3
 0.20804139E-07 0.91319563E-12-0.53071340E+05 0.33215393E+02                4
c7h13oCqG  Thergas       c   7h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.82995027E+00 0.75562038E-01-0.30756626E-04 0.55703624E-08-0.37517193E-12    2
-0.47112914E+05 0.53493473E+02 0.13843561E+01 0.94782956E-01-0.66182307E-04    3
 0.18075669E-07 0.10142453E-11-0.50533328E+05 0.32173717E+02                4
c7h13oDqA  Thergas       c   7h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.82995027E+00 0.75562038E-01-0.30756626E-04 0.55703624E-08-0.37517193E-12    2
-0.47112914E+05 0.53493473E+02 0.13843561E+01 0.94782956E-01-0.66182307E-04    3
 0.18075669E-07 0.10142453E-11-0.50533328E+05 0.32173717E+02                4
c7h13oDqB  Thergas       c   7h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51406007E+01 0.83614781E-01-0.35064513E-04 0.64851395E-08-0.44334276E-12    2
-0.47900359E+05 0.76958130E+02 0.93298864E+00 0.98839752E-01-0.72162977E-04    3
 0.20804139E-07 0.91319563E-12-0.53071336E+05 0.33215385E+02                4
c7h13oDqC  Thergas       c   7h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13408147E+01 0.77609472E-01-0.32024709E-04 0.58552172E-08-0.39697613E-12    2
-0.48497754E+05 0.55278328E+02-0.15882219E+00 0.10120784E+00-0.72047580E-04    3
 0.19125622E-07 0.14651040E-11-0.51827992E+05 0.38637489E+02                4
c6h13hco                 c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14832831E+02 0.42191949E-01-0.14674234E-04 0.23796207E-08-0.14834138E-12    2
-0.39982094E+05-0.43669754E+02 0.28977060E+00 0.81262469E-01-0.48522768E-04    3
 0.10197268E-07 0.13261417E-11-0.35940754E+05 0.31669395E+02                4
c6h13co                  c   7h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21888067E+02 0.17680371E-01-0.45973793E-05 0.60718119E-09-0.32980075E-13    2
-0.31535605E+05-0.78729637E+02 0.63410324E+00 0.80357298E-01-0.71632960E-04    3
 0.30559153E-07-0.43843913E-11-0.25892623E+05 0.30032263E+02                4
heptanone                c   7h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14112068E+02 0.43220736E-01-0.15153935E-04 0.24738356E-08-0.15505617E-12    2
-0.43389070E+05-0.40253830E+02 0.24841607E-01 0.80699012E-01-0.47310896E-04    3
 0.99093880E-08 0.11545299E-11-0.39442801E+05 0.32851570E+02                4
c6h11hco                 c   7h  12o   10    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11528383E+02 0.42176731E-01-0.15288200E-04 0.25529086E-08-0.16244418E-12    2
-0.24830617E+05-0.25402847E+02 0.63094932E+00 0.73500216E-01-0.43179643E-04    3
 0.88242187E-08 0.99969967E-12-0.22098035E+05 0.30115221E+02                4
c6h11co                  c   7h  11o   10    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13349758E+02 0.35031658E-01-0.11402005E-04 0.17652914E-08-0.10663082E-12    2
-0.74649297E+04-0.33384865E+02 0.10643209E+01 0.71520865E-01-0.49151753E-04    3
 0.17507743E-07-0.23133568E-11-0.43351152E+04 0.29169792E+02                4
p2c4h614                 c   7h  13o   00    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.19672320E+02 0.27687470E-01-0.79897730E-05 0.11365280E-08-0.64848860E-13    2
 0.60075160E+04-0.73268260E+02-0.35493880E+01 0.93466240E-01-0.78503050E-04    3
 0.36474530E-07-0.74456470E-11 0.12485930E+05 0.46685370E+02                4
p2c4h513                 c   7h  12o   00    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.17810300E+02 0.29455120E-01-0.96432360E-05 0.14973100E-08-0.90522930E-13    2
-0.41163220E+04-0.66349990E+02-0.21090900E+01 0.81644630E-01-0.53366480E-04    3
 0.11908060E-07 0.93417400E-12 0.14750950E+04 0.37193940E+02                4
P2c4h4134                c   7h  11o   00    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.18452930E+02 0.24773082E-01-0.71930749E-05 0.10243644E-08-0.58311944E-13    2
 0.11457330E+05-0.68984505E+02-0.18032148E+01 0.82243092E-01-0.66798581E-04    3
 0.28468435E-07-0.51140979E-11 0.16997111E+05 0.35388664E+02                4
c7h15qA  Thergas         c   7h  16o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22259567E+02 0.39039500E-01-0.12527654E-04 0.19213278E-08-0.11536549E-12    2
-0.42969816E+05-0.80113808E+02 0.78303146E+00 0.91929533E-01-0.54194406E-04    3
 0.11186543E-07 0.85612843E-12-0.36559984E+05 0.32852917E+02                4
c7h15qB  Thergas         c   7h  16o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45540085E+02 0.56950124E-02-0.56391104E-06 0.30786974E-10-0.67499420E-15    2
-0.55382578E+05-0.21307001E+03 0.25284660E+01 0.83489791E-01-0.38689272E-04    3
 0.27794507E-08 0.59041736E-12-0.39365277E+05 0.24247658E+02                4
c7h15qC  Thergas         c   7h  16o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45540085E+02 0.56950124E-02-0.56391104E-06 0.30786974E-10-0.67499420E-15    2
-0.55110836E+05-0.21307001E+03 0.25284660E+01 0.83489791E-01-0.38689272E-04    3
 0.27794507E-08 0.59041736E-12-0.39093539E+05 0.24247658E+02                4
c7h15qD  Thergas         c   7h  16o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45540085E+02 0.56950124E-02-0.56391104E-06 0.30786974E-10-0.67499420E-15    2
-0.55110836E+05-0.21376309E+03 0.25284660E+01 0.83489791E-01-0.38689272E-04    3
 0.27794507E-08 0.59041736E-12-0.39093539E+05 0.23554575E+02                4
c7h15ojA  Thergas        c   7h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20147518E+02 0.35569735E-01-0.10786423E-04 0.15909123E-08-0.93105482E-13    2
-0.24435533E+05-0.73650505E+02-0.19387127E+01 0.91656856E-01-0.60571478E-04    3
 0.19492074E-07-0.22175178E-11-0.17848250E+05 0.42285233E+02                4
c7h15ojB  Thergas        c   7h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42201836E+02 0.46893391E-02-0.33688048E-06 0.41088756E-11 0.84469582E-15    2
-0.35364449E+05-0.19993668E+03-0.13810614E+00 0.82815491E-01-0.44061620E-04    3
 0.10052279E-07-0.21107768E-11-0.19602391E+05 0.33452026E+02                4
c7h15ojC  Thergas        c   7h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42201836E+02 0.46893391E-02-0.33688048E-06 0.41088756E-11 0.84469582E-15    2
-0.35092617E+05-0.19993794E+03-0.19026795E+00 0.83179429E-01-0.44940767E-04    3
 0.10933971E-07-0.24239736E-11-0.19325100E+05 0.33671124E+02                4
c7h15ojD  Thergas        c   7h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42201836E+02 0.46893391E-02-0.33688048E-06 0.41088756E-11 0.84469582E-15    2
-0.35092617E+05-0.20063135E+03-0.19026795E+00 0.83179429E-01-0.44940767E-04    3
 0.10933971E-07-0.24239736E-11-0.19325100E+05 0.32977711E+02                4
! Base C8
nc8h18  Burcat    P 4/85c  8.h 18.   0.   0.G   200.000  6000.000 1000.      1
 2.09430708E+01 4.41691018E-02-1.53261633E-05 2.30544803E-09-1.29765727E-13    2
-3.55755088E+04-8.10637726E+01 1.25245480E+01-1.01018826E-02 2.21992610E-04    3
-2.84863722E-07 1.12410138E-10-2.98434398E+04-1.97109989E+01-2.51067110E+04    4
Ac8h17                   c   8h  17o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17711723E+02 0.44938747E-01-0.14443744E-04 0.22178346E-08-0.13328675E-12    2
-0.91992578E+04-0.59223930E+02-0.41161755E+00 0.92210799E-01-0.52641371E-04    3
 0.85863769E-08 0.25689132E-11-0.41119761E+04 0.34996040E+02                4
Bc8h17                   c   8h  17o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15256751E+02 0.48388578E-01-0.15932041E-04 0.24870652E-08-0.15109519E-12    2
-0.93191055E+04-0.45259941E+02 0.53211296E+00 0.86344220E-01-0.41959614E-04    3
-0.41950546E-09 0.55876358E-11-0.53175322E+04 0.31046585E+02                4
Cc8h17                   c   8h  17o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15473525E+02 0.47954667E-01-0.15733860E-04 0.24514557E-08-0.14881331E-12    2
-0.93548457E+04-0.46354050E+02-0.66160369E+00 0.94780222E-01-0.61068029E-04    3
 0.17316298E-07-0.33548769E-12-0.51999800E+04 0.36036736E+02                4
Dc8h17                   c   8h  17o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15473525E+02 0.47954667E-01-0.15733860E-04 0.24514557E-08-0.14881331E-12    2
-0.93548457E+04-0.46354050E+02-0.66160369E+00 0.94780222E-01-0.61068029E-04    3
 0.17316298E-07-0.33548769E-12-0.51999800E+04 0.36036736E+02                4
c8h16-1  Burcat   n 4/87c   8h  16    0    0G    200.000  6000.000 1000.000   1
 2.43378771E+01 3.22574569E-02-1.03389736E-05 1.65359772E-09-1.00909018E-13    2
-2.14383953E+04-9.82405127E+01 1.01483726E+01 1.25438065E-03 1.85245518E-04    3
-2.49087148E-07 1.00247926E-10-1.43267638E+04-8.51901783E+00-1.00535089E+04    4
c8h16-2  Thergas         c   8h  16    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.20515318E+02 0.38395379E-01-0.12404871E-04 0.19124877E-08-0.11529312E-12    2
-0.21493453E+05-0.77945305E+02 0.89102447E-01 0.83211556E-01-0.42554078E-04    3
 0.64605836E-08 0.10791694E-11-0.14801507E+05 0.31597778E+02                4
c8h16-3  Thergas         c   8h  16    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.20515678E+02 0.38472977E-01-0.12439130E-04 0.19172688E-08-0.11548150E-12    2
-0.21537992E+05-0.78110753E+02-0.12177379E+01 0.88285185E-01-0.48694645E-04    3
 0.93159036E-08 0.64524352E-12-0.14627312E+05 0.37670788E+02                4
c8h16-4  Thergas         c   8h  16    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.20515678E+02 0.38472977E-01-0.12439130E-04 0.19172688E-08-0.11548150E-12    2
-0.21537992E+05-0.78810570E+02-0.12177379E+01 0.88285185E-01-0.48694645E-04    3
 0.93159036E-08 0.64524352E-12-0.14627312E+05 0.36977707E+02                4
```

```
c8h14                    c   8h  14o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                4
Cc8h15-1 Thergas         c   8h  15    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.21737583E+02 0.33460941E-01-0.99058989E-05 0.14333605E-08-0.82648007E-13    2
-0.44474629E+04-0.83853943E+02-0.34678480E+00 0.84996723E-01-0.50083854E-04    3
 0.12880106E-07-0.81115946E-12 0.25456824E+04 0.33619202E+02                4
Dc8h15-2 Thergas         c   8h  15    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.21389673E+02 0.33655670E-01-0.99631316E-05 0.14432119E-08-0.83364671E-13    2
-0.62572715E+04-0.82560768E+02 0.50654387E+00 0.81751719E-01-0.49447310E-04    3
 0.16511329E-07-0.28800835E-11 0.53154126E+03 0.29017292E+02                4
Ec8h15-3 Thergas         c   8h  15    0    0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.21422712E+02 0.33669908E-01-0.99574481E-05 0.14384294E-08-0.82773422E-13    2
-0.63137578E+04-0.82942078E+02-0.60666478E+00 0.85509211E-01-0.52461917E-04    3
 0.16270750E-07-0.22249440E-11 0.68447821E+03 0.34235840E+02                4
Hc8h15-1   3/19/ 7 ThERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.39354727E+01 3.32240658E-02-1.12927334E-05 1.74603459E-09-1.01016541E-13    2
 2.61693443E+03-9.47424234E+01-1.12171647E+00 9.00446710E-02-6.02418170E-05    3
 2.08658979E-08-2.96705457E-12 1.15050583E+04 4.04630702E+01                4
c8h16rohAB  Thergas      c   8h  17o   1     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.23564270E+02 0.38258202E-01-0.11292649E-04 0.16316158E-08-0.94040125E-13    2
-0.30545824E+05-0.86778961E+02-0.17422894E+01 0.10997684E+00-0.91319067E-04    3
 0.45735071E-07-0.10580545E-10-0.23351672E+05 0.44247601E+02                4
c8h16rohBC  Thergas      c   8h  17o   1     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.45719635E+02 0.71898475E-02-0.76359288E-06 0.49221138E-10-0.16093956E-14    2
-0.42565676E+05-0.21361836E+03-0.68904638E+01 0.10200226E+00-0.76855184E-04    3
 0.38304520E-07-0.11174440E-10-0.26148734E+05 0.35952484E+02                4
c8h16rohCD  Thergas      c   8h  17o   1     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.45719635E+02 0.71898475E-02-0.76359288E-06 0.49221138E-10-0.16093956E-14    2
-0.42293934E+05-0.21361836E+03-0.68904638E+01 0.10200226E+00-0.76855184E-04    3
 0.38304520E-07-0.11174440E-10-0.25876994E+05 0.35952484E+02                4
c8h16rohDE  Thergas      c   8h  17o   1     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.45719635E+02 0.71898475E-02-0.76359288E-06 0.49221138E-10-0.16093956E-14    2
-0.42293934E+05-0.21361836E+03-0.68904638E+01 0.10200226E+00-0.76855184E-04    3
 0.38304520E-07-0.11174440E-10-0.25876994E+05 0.35952484E+02                4
c8h16qjohAB  Thergas     c   8h  17o   3     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.49543304E+02 0.88642351E-02-0.10593947E-05 0.71530545E-10-0.21836071E-14    2
-0.59546418E+05-0.22931769E+03 0.17118201E+01 0.10258979E+00-0.58342259E-04    3
 0.12926417E-07-0.14700809E-11-0.42403562E+05 0.32088375E+02                4
c8h16qjohBC  Thergas     c   8h  17o   3     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.13134670E+02 0.64088285E-01-0.22936552E-04 0.37962580E-08-0.24009348E-12    2
-0.46665516E+05-0.23435730E+02-0.12066903E+01 0.12050679E+00-0.87490123E-04    3
 0.26544198E-07-0.55591756E-12-0.44639367E+05 0.43985474E+02                4
c8h16qjohCD  Thergas     c   8h  17o   3     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.13134670E+02 0.64088285E-01-0.22936552E-04 0.37962580E-08-0.24009348E-12    2
-0.46393777E+05-0.23435829E+02-0.12066903E+01 0.12050679E+00-0.87490123E-04    3
 0.26544198E-07-0.55591756E-12-0.44367629E+05 0.43985374E+02                4
c8h16qjohDE  Thergas     c   8h  17o   3     0G   300.0    5000.0   1000.0     1
 0.13134670E+02 0.64088285E-01-0.22936552E-04 0.37962580E-08-0.24009348E-12    2
-0.46393777E+05-0.23435692E+02-0.12066903E+01 0.12050679E+00-0.87490123E-04    3
 0.26544198E-07-0.55591756E-12-0.44367629E+05 0.43985512E+02                4
c8h17qjA                 c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23837385E+02 0.42712577E-01-0.13211903E-04 0.19715394E-08-0.11604503E-12    2
-0.28495770E+05-0.87923416E+02 0.23201631E+00 0.10027643E+00-0.52595424E-04    3
 0.10543411E-08 0.62379199E-11-0.21585980E+05 0.35981842E+02                4
c8h17qjB                 c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23965502E+02 0.42749967E-01-0.13245375E-04 0.19773809E-08-0.11634217E-12    2
-0.30904680E+05-0.88942596E+02 0.46039734E+01 0.71811020E-01 0.16481061E-04    3
-0.67313458E-07 0.29836730E-10-0.24650395E+05 0.16486511E+02                4
c8h17qjC                 c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.23915356E+02 0.42840220E-01-0.13298933E-04 0.19901578E-08-0.11739886E-12    2
-0.30612957E+05-0.88664673E+02 0.45415640E+01 0.72257660E-01 0.15376816E-04    3
-0.66184285E-07 0.29429216E-10-0.24372180E+05 0.16747589E+02                4
c8h17qjD                 c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23915356E+02 0.42840220E-01-0.13298933E-04 0.19901578E-08-0.11739886E-12    2
-0.30612930E+05-0.88664986E+02 0.45264950E+01 0.72360016E-01 0.15135624E-04    3
-0.65947525E-07 0.29346619E-10-0.24370535E+05 0.16811335E+02                4
c8h16rAqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24398270E+02 0.40827934E-01-0.12289628E-04 0.17986254E-08-0.10446638E-12    2
-0.24460887E+05-0.86766251E+02 0.49460086E+00 0.10770760E+00-0.78272606E-04    3
 0.27413611E-07-0.26853060E-11-0.17890303E+05 0.36573154E+02                4
c8h16rBqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24392391E+02 0.40867936E-01-0.12321221E-04 0.18071090E-08-0.10521295E-12    2
-0.22592340E+05-0.86727013E+02 0.35334688E+00 0.10872400E+00-0.80511272E-04    3
 0.29477656E-07-0.33727461E-11-0.16015442E+05 0.37161160E+02                4
c8h16rCqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24392391E+02 0.40867936E-01-0.12321221E-04 0.18071090E-08-0.10521295E-12    2
-0.22592340E+05-0.86727013E+02 0.35334688E+00 0.10872400E+00-0.80511272E-04    3
 0.29477656E-07-0.33727461E-11-0.16015442E+05 0.37161160E+02                4
c8h16rDqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24392391E+02 0.40867936E-01-0.12321221E-04 0.18071090E-08-0.10521295E-12    2
-0.22592340E+05-0.86727013E+02 0.35334688E+00 0.10872400E+00-0.80511272E-04    3
 0.29477656E-07-0.33727461E-11-0.16015442E+05 0.37161160E+02                4
c8h16rEqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24430122E+02 0.40796444E-01-0.12277092E-04 0.17962856E-08-0.10429927E-12    2
-0.22606721E+05-0.86935432E+02 0.49619520E+00 0.10771184E+00-0.78031917E-04    3
 0.26962516E-07-0.24711344E-11-0.16030409E+05 0.36559269E+02                4
c8h16rFqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24430122E+02 0.40796444E-01-0.12277092E-04 0.17962856E-08-0.10429927E-12    2
-0.22606721E+05-0.86935432E+02 0.49619520E+00 0.10771184E+00-0.78031917E-04    3
 0.26962516E-07-0.24711344E-11-0.16030409E+05 0.36559269E+02                4
c8h16rGqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24173840E+02 0.41293643E-01-0.12508925E-04 0.18402215E-08-0.10732685E-12    2
-0.22553434E+05-0.85616409E+02 0.14638233E+01 0.10085572E+00-0.62744584E-04    3
 0.13062810E-07 0.20879867E-11-0.16123945E+05 0.32524899E+02                4
c8h16rHqA                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24734673E+02 0.40866744E-01-0.12380868E-04 0.18226740E-08-0.10641672E-12    2
-0.21657582E+05-0.88919724E+02 0.78321356E+00 0.10476414E+00-0.68326510E-04    3
 0.16514877E-07 0.12214908E-11-0.14944906E+05 0.35377144E+02                4
c8h16rAqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.24388863E+05-0.89526779E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.18351637E+05 0.16282846E+02                4
c8h16rBqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23968153E+02 0.41341439E-01-0.12493553E-04 0.18337386E-08-0.10671992E-12    2
-0.27656668E+05-0.85023422E+02 0.53970332E+01 0.76440632E-01-0.58514347E-05    3
-0.42526903E-07 0.21204529E-10-0.22021275E+05 0.14300138E+02                4
c8h16rCqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24977697E+05-0.87431915E+02 0.46011391E+01 0.81132486E-01-0.13564429E-04    3
-0.36737184E-07 0.19455798E-10-0.19066752E+05 0.18187159E+02                4
c8h16rDqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24977697E+05-0.87431915E+02 0.46011391E+01 0.81132486E-01-0.13564429E-04    3
-0.36737184E-07 0.19455798E-10-0.19066752E+05 0.18187159E+02                4
c8h16rEqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24977836E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.19075662E+05 0.17830359E+02                4
c8h16rFqB                c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
```

```
-0.24977836E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.19075662E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rGqB               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24222986E+02 0.41472945E-01-0.12626470E-04 0.18662298E-08-0.10930362E-12    2
-0.24930779E+05-0.86198288E+02 0.56694427E+01 0.73551387E-01 0.35266005E-05    3
-0.52492691E-07 0.24688638E-10-0.19170672E+05 0.13730223E+02                   4
c8h16rHqB               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.24036600E+05-0.89526772E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.17999373E+05 0.16282854E+02                   4
c8h16rAqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.23764859E+05-0.89526772E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.17727633E+05 0.16282854E+02                   4
c8h16rBqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24222986E+02 0.41472945E-01-0.12626470E-04 0.18662298E-08-0.10930362E-12    2
-0.24659039E+05-0.86198288E+02 0.56694427E+01 0.73551387E-01 0.35266005E-05    3
-0.52492691E-07 0.24688638E-10-0.18898932E+05 0.13730223E+02                   4
c8h16rCqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24153397E+02 0.40974159E-01-0.12339886E-04 0.18086352E-08-0.10526233E-12    2
-0.27410355E+05-0.85948105E+02 0.43489866E+01 0.83871476E-01-0.22556487E-04    3
-0.27180803E-07 0.16124430E-10-0.21647650E+05 0.18672619E+02                   4
c8h16rDqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24705957E+05-0.87431915E+02 0.46011391E+01 0.81132486E-01-0.13564429E-04    3
-0.36737184E-07 0.19455798E-10-0.18795012E+05 0.18187159E+02                   4
c8h16rEqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24706096E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.18803922E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rFqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24706096E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.18803922E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rGqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24222986E+02 0.41472945E-01-0.12626470E-04 0.18662298E-08-0.10930362E-12    2
-0.24659039E+05-0.86198288E+02 0.56694427E+01 0.73551387E-01 0.35266005E-05    3
-0.52492691E-07 0.24688638E-10-0.18898932E+05 0.13730223E+02                   4
c8h16rHqC               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.23764859E+05-0.89526772E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.17727633E+05 0.16282854E+02                   4
c8h16rAqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.23764859E+05-0.89526772E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.17727633E+05 0.16282854E+02                   4
c8h16rBqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24222986E+02 0.41472945E-01-0.12626470E-04 0.18662298E-08-0.10930362E-12    2
-0.24659039E+05-0.86198288E+02 0.56694427E+01 0.73551387E-01 0.35266005E-05    3
-0.52492691E-07 0.24688638E-10-0.18898932E+05 0.13730223E+02                   4
c8h16rCqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24706096E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.18803922E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rDqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24153397E+02 0.40974159E-01-0.12339886E-04 0.18086352E-08-0.10526233E-12    2
-0.27410355E+05-0.85948105E+02 0.43489866E+01 0.83871476E-01-0.22556487E-04    3
-0.27180803E-07 0.16124430E-10-0.21647650E+05 0.18672619E+02                   4
c8h16rEqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24706096E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
```

```
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.18803922E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rFqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24464071E+02 0.41002266E-01-0.12409941E-04 0.18258952E-08-0.10657201E-12    2
-0.24706096E+05-0.87432289E+02 0.46857142E+01 0.80536321E-01-0.12110846E-04    3
-0.38206636E-07 0.19981369E-10-0.18803922E+05 0.17830359E+02                   4
c8h16rGqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24222986E+02 0.41472945E-01-0.12626470E-04 0.18662298E-08-0.10930362E-12    2
-0.24659039E+05-0.86198288E+02 0.56694427E+01 0.73551387E-01 0.35266005E-05    3
-0.52492691E-07 0.24688638E-10-0.18898932E+05 0.13730223E+02                   4
c8h16rHqD               c   8h  17o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24788403E+02 0.41036546E-01-0.12492123E-04 0.18470608E-08-0.10825206E-12    2
-0.23764859E+05-0.89526772E+02 0.50590549E+01 0.76988555E-01-0.96092481E-06    3
-0.50098866E-07 0.24186082E-10-0.17727633E+05 0.16282854E+02                   4
c8h16qjAqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28969364E+02 0.40812921E-01-0.12041199E-04 0.17356532E-08-0.99683472E-13    2
-0.44212496E+05-0.10938862E+03 0.34115384E+01 0.91203809E-01-0.82296237E-05    3
-0.54366573E-07 0.27449812E-10-0.36604980E+05 0.26675274E+02                   4
c8h16qjBqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28908907E+02 0.42040508E-01-0.12712560E-04 0.18699571E-08-0.10916676E-12    2
-0.42264828E+05-0.10748518E+03 0.66762586E+01 0.79650238E-01 0.99823546E-05    3
-0.67192715E-07 0.30972731E-10-0.35352727E+05 0.12385740E+02                   4
c8h16qjCqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28908907E+02 0.42040508E-01-0.12712560E-04 0.18699571E-08-0.10916676E-12    2
-0.42264828E+05-0.10748532E+03 0.66762586E+01 0.79650238E-01 0.99823546E-05    3
-0.67192715E-07 0.30972731E-10-0.35352727E+05 0.12385594E+02                   4
c8h16qjDqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28908907E+02 0.42040508E-01-0.12712560E-04 0.18699571E-08-0.10916676E-12    2
-0.42264828E+05-0.10679222E+03 0.66762586E+01 0.79650238E-01 0.99823546E-05    3
-0.67192715E-07 0.30972731E-10-0.35352727E+05 0.13078692E+02                   4
c8h16qjEqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28984390E+02 0.41904449E-01-0.12631688E-04 0.18506419E-08-0.10756721E-12    2
-0.42294289E+05-0.10721059E+03 0.64258146E+01 0.81388950E-01 0.58026653E-05    3
-0.63018476E-07 0.29494875E-10-0.35325953E+05 0.14139282E+02                   4
c8h16qjFqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28984390E+02 0.41904449E-01-0.12631688E-04 0.18506419E-08-0.10756721E-12    2
-0.42294125E+05-0.10720964E+03 0.63360910E+01 0.82006074E-01 0.43328378E-05    3
-0.61562943E-07 0.28983397E-10-0.35316277E+05 0.14520504E+02                   4
c8h16qjGqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28920816E+02 0.42018887E-01-0.12699694E-04 0.18668969E-08-0.10891479E-12    2
-0.42540738E+05-0.10685497E+03 0.63965335E+01 0.81592016E-01 0.53154367E-05    3
-0.62532720E-07 0.29323103E-10-0.35594562E+05 0.14265111E+02                   4
c8h16qjHqA              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28824947E+02 0.41923393E-01-0.12631052E-04 0.18523704E-08-0.10787587E-12    2
-0.40145129E+05-0.10670961E+03 0.22598255E+01 0.10842140E+00-0.59820239E-04    3
 0.18916917E-08 0.71228873E-11-0.32555262E+05 0.32071541E+02                   4
c8h16qjAqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28908907E+02 0.42040508E-01-0.12712560E-04 0.18699571E-08-0.10916676E-12    2
-0.42264828E+05-0.10748506E+03 0.66762586E+01 0.79650238E-01 0.99823546E-05    3
-0.67192715E-07 0.30972731E-10-0.35352727E+05 0.12385856E+02                   4
c8h16qjBqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26558331E+02 0.46082657E-01-0.14487518E-04 0.21872659E-08-0.12979231E-12    2
-0.45525348E+05-0.98423920E+02 0.40645599E+01 0.85849129E-01 0.77742488E-05    3
-0.71444994E-07 0.34062871E-10-0.38765871E+05 0.22056112E+02                   4
c8h16qjCqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448687E+05-0.11663023E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.37225270E+05 0.39490166E+02                   4
c8h16qjDqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448687E+05-0.11663022E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.37225270E+05 0.39490189E+02                   4
```

```
c8h16qjEqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448687E+05-0.11663002E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.37225270E+05 0.39490387E+02                   4
c8h16qjFqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448715E+05-0.11662958E+03 0.11109174E+00 0.12521961E+00-0.92729671E-04    3
 0.28333153E-07-0.56137836E-12-0.37226914E+05 0.39426769E+02                   4
c8h16qjGqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45720316E+05-0.11662787E+03 0.36334388E-01 0.12573509E+00-0.93959970E-04    3
 0.29553581E-07-0.99083545E-12-0.37490613E+05 0.39745106E+02                   4
c8h16qjHqB              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29004236E+02 0.41869614E-01-0.12611668E-04 0.18460197E-08-0.10719631E-12    2
-0.42574379E+05-0.10732315E+03 0.66225219E+01 0.80015264E-01 0.91233396E-05    3
-0.66350523E-07 0.30679011E-10-0.35618602E+05 0.13306735E+02                   4
c8h16qjAqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29004236E+02 0.41869614E-01-0.12611668E-04 0.18460197E-08-0.10719631E-12    2
-0.42302641E+05-0.10801567E+03 0.66225219E+01 0.80015264E-01 0.91233396E-05    3
-0.66350523E-07 0.30679011E-10-0.35346859E+05 0.12614204E+02                   4
c8h16qjBqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448578E+05-0.11662787E+03 0.36334388E-01 0.12573509E+00-0.93959970E-04    3
 0.29553581E-07-0.99083545E-12-0.37218875E+05 0.39745106E+02                   4
c8h16qjCqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26558331E+02 0.46082657E-01-0.14487518E-04 0.21872659E-08-0.12979231E-12    2
-0.45525348E+05-0.98424225E+02 0.40645599E+01 0.85849129E-01 0.77742488E-05    3
-0.71444994E-07 0.34062871E-10-0.38765871E+05 0.22055805E+02                   4
c8h16qjDqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176945E+05-0.11663022E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.36953527E+05 0.39490189E+02                   4
c8h16qjEqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176945E+05-0.11593694E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.36953527E+05 0.40183472E+02                   4
c8h16qjFqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176973E+05-0.11593649E+03 0.11109174E+00 0.12521961E+00-0.92729671E-04    3
 0.28333153E-07-0.56137836E-12-0.36955176E+05 0.40119854E+02                   4
c8h16qjGqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448578E+05-0.11593480E+03 0.36334388E-01 0.12573509E+00-0.93959970E-04    3
 0.29553581E-07-0.99083545E-12-0.37218875E+05 0.40438179E+02                   4
c8h16qjHqC              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29004236E+02 0.41869614E-01-0.12611668E-04 0.18460197E-08-0.10719631E-12    2
-0.42302641E+05-0.10801617E+03 0.66225219E+01 0.80015264E-01 0.91233396E-05    3
-0.66350523E-07 0.30679011E-10-0.35346859E+05 0.12613706E+02                   4
c8h16qjAqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29004236E+02 0.41869614E-01-0.12611668E-04 0.18460197E-08-0.10719631E-12    2
-0.42302641E+05-0.10801590E+03 0.66225219E+01 0.80015264E-01 0.91233396E-05    3
-0.66350523E-07 0.30679011E-10-0.35346859E+05 0.12613975E+02                   4
c8h16qjBqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448578E+05-0.11662787E+03 0.36334388E-01 0.12573509E+00-0.93959970E-04    3
 0.29553581E-07-0.99083545E-12-0.37218875E+05 0.39745106E+02                   4
c8h16qjCqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176973E+05-0.11662958E+03 0.11109174E+00 0.12521961E+00-0.92729671E-04    3
 0.28333153E-07-0.56137836E-12-0.36955176E+05 0.39426769E+02                   4
c8h16qjDqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.26558331E+02 0.46082657E-01-0.14487518E-04 0.21872659E-08-0.12979231E-12    2
-0.45525348E+05-0.98424347E+02 0.40645599E+01 0.85849129E-01 0.77742488E-05    3
-0.71444994E-07 0.34062871E-10-0.38765871E+05 0.22055681E+02                   4
c8h16qjEqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176945E+05-0.11593692E+03 0.96023299E-01 0.12532197E+00-0.92970855E-04    3
 0.28569907E-07-0.64397766E-12-0.36953527E+05 0.40183479E+02                   4
c8h16qjFqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45176973E+05-0.11593649E+03 0.11109174E+00 0.12521961E+00-0.92729671E-04    3
 0.28333153E-07-0.56137836E-12-0.36955176E+05 0.40119854E+02                   4
c8h16qjGqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30408714E+02 0.40409509E-01-0.12091734E-04 0.17658035E-08-0.10260395E-12    2
-0.45448578E+05-0.11593480E+03 0.36334388E-01 0.12573509E+00-0.93959970E-04    3
 0.29553581E-07-0.99083545E-12-0.37218875E+05 0.40438179E+02                   4
c8h16qjHqD              c   8h  17o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29004236E+02 0.41869614E-01-0.12611668E-04 0.18460197E-08-0.10719631E-12    2
-0.42302641E+05-0.10801607E+03 0.66225219E+01 0.80015264E-01 0.91233396E-05    3
-0.66350523E-07 0.30679011E-10-0.35346859E+05 0.12613813E+02                   4
c8h16o-AB    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.50334068E+02 0.11279787E-02 0.33135652E-07-0.15339801E-10 0.13102104E-14    2
-0.46716391E+05-0.24704681E+03 0.62810701E+00 0.85132569E-01-0.35248268E-04    3
 0.11291738E-08-0.16217606E-12-0.27505689E+05 0.29605301E+02                   4
c8h16o-BC    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23893927E+02 0.38813151E-01-0.12690612E-04 0.19691966E-08-0.11902572E-12    2
-0.37669566E+05-0.97200981E+02-0.18688216E+01 0.10060990E+00-0.60021510E-04    3
 0.12151985E-07 0.97320578E-12-0.29792369E+05 0.38963161E+02                   4
c8h16o-CD    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23893927E+02 0.38813151E-01-0.12690612E-04 0.19691966E-08-0.11902572E-12    2
-0.37397828E+05-0.97200981E+02-0.18688216E+01 0.10060990E+00-0.60021510E-04    3
 0.12151985E-07 0.97320578E-12-0.29520629E+05 0.38963161E+02                   4
c8h16o-DE    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23893927E+02 0.38813151E-01-0.12690612E-04 0.19691966E-08-0.11902572E-12    2
-0.37397828E+05-0.98587151E+02-0.18688216E+01 0.10060990E+00-0.60021510E-04    3
 0.12151985E-07 0.97320578E-12-0.29520629E+05 0.37576996E+02                   4
c8h16o-AC    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.49604404E+02 0.17157613E+00-0.84526444E-04 0.17538499E-07-0.13039584E-11    2
-0.90059404E+04 0.30754904E+03-0.62587652E+01 0.11534862E+00-0.82837360E-04    3
 0.24663162E-07 0.19238595E-11-0.27227586E+05 0.60329090E+02                   4
c8h16o-BD    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.49604404E+02 0.17157613E+00-0.84526444E-04 0.17538499E-07-0.13039584E-11    2
-0.90059404E+04 0.30754904E+03-0.62587652E+01 0.11534862E+00-0.82837360E-04    3
 0.24663162E-07 0.19238595E-11-0.27227586E+05 0.60329090E+02                   4
c8h16o-CE    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.49604404E+02 0.17157613E+00-0.84526444E-04 0.17538499E-07-0.13039584E-11    2
-0.90059404E+04 0.30754904E+03-0.62587652E+01 0.11534862E+00-0.82837360E-04    3
 0.24663162E-07 0.19238595E-11-0.27227586E+05 0.60329090E+02                   4
c8h16o#4                c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10912266E+02 0.62802188E-01-0.24620029E-04 0.43439745E-08-0.28728558E-12    2
-0.34025164E+05-0.28330185E+02-0.91580505E+01 0.13815616E+00-0.13925759E-03    3
 0.84193424E-07-0.20929314E-10-0.29253268E+05 0.70819481E+02                   4
c8h16o-AD    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.90792189E+01 0.96842654E-01-0.42314106E-04 0.80553937E-08-0.56217888E-12    2
-0.32615012E+05 0.84625175E+02-0.34969556E+01 0.11354265E+00-0.79268611E-04    3
 0.19645636E-07 0.23282851E-11-0.37704758E+05 0.43255486E+02                   4
c8h16o-BE    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13438491E+02 0.10523880E+00-0.47019734E-04 0.90958210E-08-0.64228695E-12    2
-0.33421664E+05 0.10754987E+03-0.40804915E+01 0.11852957E+00-0.87520340E-04    3
 0.24680279E-07 0.13968884E-11-0.40228797E+05 0.44162018E+02                   4
c8h16o-CF    Thergas    c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13438491E+02 0.10523880E+00-0.47019734E-04 0.90958210E-08-0.64228695E-12    2
```

```
-0.33149922E+05 0.10616370E+03-0.40804915E+01 0.11852957E+00-0.87520340E-04    3
 0.24680279E-07 0.13968884E-11-0.39957055E+05 0.42775852E+02                   4
c8h16o-AE    Thergas     c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.90792189E+01 0.96842654E-01-0.42314106E-04 0.80553937E-08-0.56217888E-12    2
-0.35332414E+05 0.81907768E+02-0.34969556E+01 0.11354265E+00-0.79268611E-04    3
 0.19645636E-07 0.23282851E-11-0.40422160E+05 0.40538078E+02                   4
c8h16o-BF    Thergas     c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13438491E+02 0.10523880E+00-0.47019734E-04 0.90958210E-08-0.64228695E-12    2
-0.36139066E+05 0.10483246E+03-0.40804915E+01 0.11852957E+00-0.87520340E-04    3
 0.24680279E-07 0.13968884E-11-0.42946199E+05 0.41444611E+02                   4
c8h16o#5             c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19923445E+02 0.47541186E-01-0.17070628E-04 0.28321352E-08-0.17942627E-12    2
-0.46442715E+05-0.79594803E+02-0.46059074E+01 0.12274635E+00-0.99378631E-04    3
 0.38559634E-07-0.43409486E-11-0.40179516E+05 0.44928009E+02                   4
c8h16o#6             c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19923445E+02 0.47541186E-01-0.17070628E-04 0.28321352E-08-0.17942627E-12    2
-0.49431859E+05-0.80926056E+02-0.46059074E+01 0.12274635E+00-0.99378631E-04    3
 0.38559634E-07-0.43409486E-11-0.43168656E+05 0.43596764E+02                   4
c8h17qA    Thergas      c   8h  18o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25184662E+02 0.43498904E-01-0.13889739E-04 0.21201378E-08-0.12674902E-12    2
-0.46847316E+05-0.94084114E+02 0.55736101E+00 0.10395036E+00-0.61846644E-04    3
 0.13528783E-07 0.57746570E-12-0.39453109E+05 0.35583321E+02                   4
c8h17qB    Thergas      c   8h  18o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49120415E+02 0.88554397E-02-0.11546297E-05 0.87920414E-10-0.32100681E-14    2
-0.59489250E+05-0.23060811E+03 0.23004239E+01 0.95498212E-01-0.46248148E-04    3
 0.49757682E-08 0.37816920E-12-0.42257711E+05 0.26992292E+02                   4
c8h17qC    Thergas      c   8h  18o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49120415E+02 0.88554397E-02-0.11546297E-05 0.87920414E-10-0.32100681E-14    2
-0.59217512E+05-0.23060811E+03 0.23004239E+01 0.95498212E-01-0.46248148E-04    3
 0.49757682E-08 0.37816920E-12-0.41985969E+05 0.26992292E+02                   4
c8h17qD    Thergas      c   8h  18o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49120415E+02 0.88554397E-02-0.11546297E-05 0.87920414E-10-0.32100681E-14    2
-0.59217512E+05-0.23060811E+03 0.23004239E+01 0.95498212E-01-0.46248148E-04    3
 0.49757682E-08 0.37816920E-12-0.41985969E+05 0.26992292E+02                   4
c8h17ojA    Thergas     c   8h  17o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23077858E+02 0.40017333E-01-0.12140343E-04 0.17876562E-08-0.10431394E-12    2
-0.28314629E+05-0.87646332E+02-0.21339333E+01 0.10345186E+00-0.67650326E-04    3
 0.21237781E-07-0.22787809E-11-0.20744408E+05 0.44891270E+02                   4
c8h17ojB    Thergas     c   8h  17o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45855083E+02 0.77120606E-02-0.85577000E-06 0.52874951E-10-0.14047611E-14    2
-0.39497055E+05-0.21787128E+03-0.39666083E+00 0.95058590E-01-0.52235642E-04    3
 0.12906283E-07-0.25684030E-11-0.22491908E+05 0.36325146E+02                   4
c8h17ojC    Thergas     c   8h  17o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45855083E+02 0.77120606E-02-0.85577000E-06 0.52874951E-10-0.14047611E-14    2
-0.39225488E+05-0.21787329E+03-0.30149898E+00 0.94388857E-01-0.50605402E-04    3
 0.11260674E-07-0.19806197E-11-0.22230203E+05 0.35921978E+02                   4
c8h17ojD    Thergas     c   8h  17o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45855083E+02 0.77120606E-02-0.85577000E-06 0.52874951E-10-0.14047611E-14    2
-0.39225625E+05-0.21787415E+03-0.22684385E+00 0.93874082E-01-0.49376766E-04    3
 0.10041895E-07-0.15517422E-11-0.22238232E+05 0.35604935E+02                   4
nc8h17o2h            c   8h  18o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20509676E+02 0.51260345E-01-0.17456196E-04 0.27899791E-08-0.17223808E-12    2
-0.47296555E+05-0.68098534E+02 0.58419657E+01 0.68428375E-01 0.26399584E-04    3
-0.76631167E-07 0.32979203E-10-0.42606453E+05 0.12312349E+02                   4
c8h15o2h             c   8h  16o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20380741E+02 0.46281371E-01-0.15725082E-04 0.25071203E-08-0.15439704E-12    2
-0.31947451E+05-0.67045532E+02 0.61335635E+01 0.62499840E-01 0.28431941E-04    3
-0.76341848E-07 0.32648498E-10-0.27376854E+05 0.11155769E+02                   4
c8h15oq              c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16870092E+02 0.68185821E-01-0.24252884E-04 0.39975974E-08-0.25215041E-12    2
-0.39237465E+05-0.53114212E+02-0.18994358E+ 0.1067324400E+00-0.35085766E-04    3
```

```
-0.21366752E-07 0.14464667E-10-0.34442055E+05 0.36377739E+02                   4
c8h15oAqB   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.53674335E+02 0.21574488E-02-0.40864947E-07-0.11245279E-10 0.11178410E-14    2
-0.70325422E+05-0.25281168E+03 0.36112106E+01 0.90610661E-01-0.40356579E-04    3
 0.74931328E-09 0.11603956E-11-0.51472324E+05 0.24173454E+02                   4
c8h15oAqC   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.81503620E+01 0.70391484E-01-0.27240338E-04 0.47624451E-08-0.31291847E-12    2
-0.51816684E+05 0.55914383E+01 0.14876269E+01 0.10638937E+00-0.71089395E-04    3
 0.17282511E-07 0.16100971E-11-0.52051160E+05 0.32888512E+02                   4
c8h15oAqD   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.81503620E+01 0.70391484E-01-0.27240338E-04 0.47624451E-08-0.31291847E-12    2
-0.51816684E+05 0.55914383E+01 0.14876269E+01 0.10638937E+00-0.71089395E-04    3
 0.17282511E-07 0.16100971E-11-0.52051160E+05 0.32888512E+02                   4
c8h15oAqE   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.81503620E+01 0.70391484E-01-0.27240338E-04 0.47624451E-08-0.31291847E-12    2
-0.51816684E+05 0.55914383E+01 0.14876269E+01 0.10638937E+00-0.71089395E-04    3
 0.17282511E-07 0.16100971E-11-0.52051160E+05 0.32888512E+02                   4
c8h15oBqA   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.83075991E+01 0.69291346E-01-0.26563011E-04 0.46145225E-08-0.30190328E-12    2
-0.52799562E+05 0.47050476E+01 0.23953123E+01 0.10109549E+00-0.65035594E-04    3
 0.15254486E-07 0.15747630E-11-0.53000477E+05 0.28962004E+02                   4
c8h15oBqC   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49241261E+02 0.72592604E-02-0.80720241E-06 0.43191655E-10-0.52818592E-15    2
-0.71960219E+05-0.22767657E+03 0.27230816E+01 0.93606509E-01-0.45303026E-04    3
 0.37047496E-08 0.99777435E-12-0.54898773E+05 0.28090195E+02                   4
c8h15oBqD   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98898249E+01 0.67276448E-01-0.25651350E-04 0.44374371E-08-0.28936651E-12    2
-0.56202789E+05-0.47461624E+01 0.13648419E+01 0.10492320E+00-0.67955152E-04    3
 0.15361115E-07 0.19037070E-11-0.55569441E+05 0.33457996E+02                   4
c8h15oBqE   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98898249E+01 0.67276448E-01-0.25651350E-04 0.44374371E-08-0.28936651E-12    2
-0.56202781E+05-0.47461624E+01 0.13648419E+01 0.10492320E+00-0.67955152E-04    3
 0.15361115E-07 0.19037070E-11-0.55569438E+05 0.33457996E+02                   4
c8h15oBqF   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.98898249E+01 0.67276448E-01-0.25651350E-04 0.44374371E-08-0.28936651E-12    2
-0.56202781E+05-0.47461624E+01 0.13648419E+01 0.10492320E+00-0.67955152E-04    3
 0.15361115E-07 0.19037070E-11-0.55569438E+05 0.33457996E+02                   4
c8h15oCqA   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.93390000E+00 0.81830658E-01-0.32885589E-04 0.59013421E-08-0.39480845E-12    2
-0.50510727E+05 0.46075485E+02 0.12537197E+01 0.10604036E+00-0.71684713E-04    3
 0.17897555E-07 0.17750154E-11-0.53435371E+05 0.34514915E+02                   4
c8h15oCqB   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31035599E+00 0.84062584E-01-0.34256384E-04 0.62102408E-08-0.41861024E-12    2
-0.51846438E+05 0.48498154E+02-0.30199182E+00 0.11254812E+00-0.77744378E-04    3
 0.19142062E-07 0.21554080E-11-0.54728617E+05 0.41032448E+02                   4
c8h15oCqD   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10569321E+00 0.84411561E-01-0.34429060E-04 0.62443286E-08-0.42098221E-12    2
-0.51766891E+05 0.49638435E+02-0.32275227E+00 0.11267214E+00-0.77983401E-04    3
 0.19313626E-07 0.21200279E-11-0.54726145E+05 0.41122940E+02                   4
c8h15oCqE   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32692564E+01 0.89652263E-01-0.37041173E-04 0.67787700E-08-0.45991428E-12    2
-0.51060488E+05 0.68963867E+02 0.90327173E+00 0.10941053E+00-0.76053111E-04    3
 0.19056801E-07 0.22147340E-11-0.55712605E+05 0.35127430E+02                   4
c8h15oCqF   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32692564E+01 0.89652263E-01-0.37041173E-04 0.67787700E-08-0.45991428E-12    2
-0.51060488E+05 0.68963867E+02 0.90327173E+00 0.10941053E+00-0.76053111E-04    3
 0.19056801E-07 0.22147340E-11-0.55712605E+05 0.35127430E+02                   4
c8h15oCqG   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32692564E+01 0.89652263E-01-0.37041173E-04 0.67787700E-08-0.45991428E-12    2
-0.51332227E+05 0.68963867E+02 0.90327173E+00 0.10941053E+00-0.76053111E-04    3
 0.19056801E-07 0.22147340E-11-0.55984348E+05 0.35127430E+02                   4
```

```
c8h15oDqA   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.93390000E+00 0.81830658E-01-0.32885589E-04 0.59013421E-08-0.39480845E-12    2
-0.50510727E+05 0.46075485E+02 0.12537197E+01 0.10604036E+00-0.71684713E-04    3
 0.17897555E-07 0.17750154E-11-0.53435371E+05 0.34514915E+02                   4
c8h15oDqB   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.36383281E+01 0.90297543E-01-0.37387152E-04 0.68535488E-08-0.46560596E-12    2
-0.51188059E+05 0.71017807E+02 0.80836082E+00 0.11002732E+00-0.77425240E-04    3
 0.20313115E-07 0.18100614E-11-0.55973637E+05 0.35534988E+02                   4
c8h15oDqC   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23586342E+00 0.84186003E-01-0.34309847E-04 0.62189027E-08-0.41906840E-12    2
-0.51817547E+05 0.48914368E+02-0.55282074E+00 0.11427741E+00-0.81866310E-04    3
 0.23218998E-07 0.72698130E-12-0.54701648E+05 0.42096024E+02                   4
c8h15oDqE   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39021969E+00 0.83918296E-01-0.34170975E-04 0.61899121E-08-0.41693079E-12    2
-0.51877949E+05 0.48054199E+02-0.25163695E+00 0.11220466E+00-0.76932760E-04    3
 0.18344201E-07 0.24339406E-11-0.54734094E+05 0.40818367E+02                   4
c8h15oDqF   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32692564E+01 0.89652263E-01-0.37041173E-04 0.67787700E-08-0.45991428E-12    2
-0.51060488E+05 0.68963867E+02 0.90327173E+00 0.10941053E+00-0.76053111E-04    3
 0.19056801E-07 0.22147340E-11-0.55712605E+05 0.35127430E+02                   4
c8h15oDqG   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32692564E+01 0.89652263E-01-0.37041173E-04 0.67787700E-08-0.45991428E-12    2
-0.51332227E+05 0.68963867E+02 0.90327173E+00 0.10941053E+00-0.76053111E-04    3
 0.19056801E-07 0.22147340E-11-0.55984348E+05 0.35127430E+02                   4
c8h15oDqH   Thergas     c   8h  16o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.83614087E+00 0.82002275E-01-0.32981116E-04 0.59228502E-08-0.39650764E-12    2
-0.50471973E+05 0.46620178E+02 0.12480025E+01 0.10608212E+00-0.71789218E-04    3
 0.18004227E-07 0.17371031E-11-0.53434789E+05 0.34538818E+02                   4
c7h15hco             c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16818151E+02 0.48181277E-01-0.16752190E-04 0.27164362E-08-0.16935562E-12    2
-0.43479937E+05-0.52365341E+02 0.15366817E+00 0.92514843E-01-0.53883396E-04    3
 0.97243600E-08 0.22533592E-11-0.38841691E+05 0.34039207E+02                   4
c7h15co              c   8h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21888067E+02 0.17680371E-01-0.45973793E-05 0.60718119E-09-0.32980075E-13    2
-0.31535605E+05-0.78729637E+02 0.63410324E+00 0.80357298E-01-0.71632960E-04    3
 0.30559153E-07-0.43843913E-11-0.25892623E+05 0.30032263E+02                   4
octanone             c   8h  16o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16195034E+02 0.49036361E-01-0.17129807E-04 0.27865095E-08-0.17408790E-12    2
-0.46926516E+05-0.49494827E+02 0.12435834E+00 0.90316460E-01-0.48742531E-04    3
 0.55133600E-08 0.34705040E-11-0.42368941E+05 0.34223633E+02                   4
c7h14hco-5   Thergas     c   8h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11877132E+02 0.52050348E-01-0.18005008E-04 0.29092970E-08-0.18094718E-12    2
-0.17503613E+05-0.21597496E+02-0.12599965E+01 0.10632874E+00-0.96253672E-04    3
 0.51725202E-07-0.11901102E-10-0.15282735E+05 0.40654591E+02                   4
oct1*o4oo    Thergas     c   8h  15o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10292596E+02 0.63479453E-01-0.23307943E-04 0.39269827E-08-0.25141198E-12    2
-0.34813062E+05-0.76308517E+01 0.80877706E-01 0.11080116E+00-0.83056919E-04    3
 0.28146953E-07-0.18778763E-11-0.34075570E+05 0.37795277E+02                   4
oct1*o2j4ooh Thergas     c   8h  15o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10849030E+02 0.62573776E-01-0.22883823E-04 0.38466257E-08-0.24597205E-12    2
-0.31175840E+05-0.89649429E+01 0.68427521E+00 0.11464635E+00-0.96999109E-04    3
 0.42468319E-07-0.66954445E-11-0.30707807E+05 0.34974228E+02                   4
oct1*o2oo4ooh Thergas    c   8h  15o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13311378E+02 0.66787191E-01-0.24674864E-04 0.41760120E-08-0.26822706E-12    2
-0.47208469E+05-0.15605194E+02 0.47606301E+00 0.12595618E+00-0.97447919E-04    3
 0.31216747E-07-0.92134460E-12-0.46329523E+05 0.41425270E+02                   4
oct1*o4*o2ooh Thergas    c   8h  14o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62371850E+01 0.94002627E-01-0.40172090E-04 0.75291302E-08-0.51961343E-12    2
-0.58963453E+05 0.89521042E+02 0.10606869E+01 0.11163237E+00-0.84458945E-04    3
 0.25736105E-07 0.47760504E-12-0.65065098E+05 0.37304520E+02                   4
c4h9coc3h6-1 Thergas     c   8h  15o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.12178297E+01 0.70042849E-01-0.26764796E-04 0.46391961E-08-0.30304920E-12    2
-0.15893626E+05 0.37505653E+02-0.15102980E+01 0.10605914E+00-0.90638830E-04    3
 0.42124377E-07-0.72543109E-11-0.17863342E+05 0.41514374E+02                   4
nc4h9coc3h6-1  14/4/09 c   8h  15o   1     0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12178297E+01 0.70042849E-01-0.26764796E-04 0.46391961E-08-0.30304920E-12    2
-0.15893626E+05 0.37505653E+02-0.15102980E+01 0.10605914E+00-0.90638830E-04    3
 0.42124377E-07-0.72543109E-11-0.17863342E+05 0.41514374E+02                   4
nc4h9coc3h6o2-1 14/4/09 c   8h  15o   3     0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31401424E+01 0.74644431E-01-0.28685547E-04 0.49904623E-08-0.32675677E-12    2
-0.33505938E+05 0.32574150E+02-0.65168277E-02 0.10944846E+00-0.81270133E-04    3
 0.26409358E-07-0.88761122E-12-0.35475645E+05 0.38799351E+02                   4
nc4h9coc3h6o2h-1 14/4/9 c   8h  16o   3     0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.83614087E+00 0.82002275E-01-0.32981116E-04 0.59228502E-08-0.39650764E-12    2
-0.50471973E+05 0.46620178E+02 0.12480025E+01 0.10608212E+00-0.71789218E-04    3
 0.18004227E-07 0.17371031E-11-0.53434789E+05 0.34538818E+02                   4
nc4h9coc3h6o-1  14/4/09 c   8h  15o   2     0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67451662E+00 0.74695259E-01-0.28871642E-04 0.50442526E-08-0.33131879E-12    2
-0.32629162E+05 0.42442413E+02-0.14103326E+01 0.10543629E+00-0.77492383E-04    3
 0.25915137E-07-0.13066043E-11-0.34730578E+05 0.43700237E+02                   4
c2h3coc3h7 4/15/ 9 THERMc   6h  10o   1     0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.87183592E+01 2.41363189E-02-8.35497476E-06 1.30748276E-09-7.62747475E-14    2
-2.96755853E+04-6.95728617E+01 3.14273123E-01 6.70372965E-02-4.78379133E-05    3
 1.84750498E-08-3.03547113E-12-2.31437069E+04 2.95218946E+01                   4
c2h3coc3h6-3 4/15/9THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 2.00687266E+01 2.06318487E-02-7.18989016E-06 1.13031085E-09-6.61524167E-14    2
-8.61351924E+03-7.68454487E+01 1.82063299E-01 6.97665556E-02-5.52860723E-05    3
 2.32191437E-08-4.03210322E-12-1.88032200E+03 2.91687528E+01                   4
c2h3coc3h6-2 4/15/9THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1376.000    41
 1.85383420E+01 2.09644783E-02-7.10726936E-06 1.09812027E-09-6.35356671E-14    2
-6.09649496E+03-6.53208710E+01 1.39542268E+00 5.77571211E-02-3.62039487E-05    3
 1.11354497E-08-1.33077569E-12 1.83960497E+02 2.79077319E+01                   4
c2h3coc4h9 4/15/ 9 THERMc   7h  12o   1     0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.18818919E+01 2.86391260E-02-9.90229082E-06 1.54844346E-09-9.02839943E-14    2
-3.37726101E+04-8.51368221E+01 1.26153359E-01 7.90711038E-02-5.58451599E-05    3
 2.12476290E-08-3.43373278E-12-2.60381588E+04 3.20788490E+01                   4
c2h3coc4h8-4 4/15/9THERMc   7h  11o   1     0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.31863030E+01 2.51741016E-02-8.75064225E-06 1.37333007E-09-8.02792956E-14    2
-1.26795211E+04-9.21173114E+01 5.51745226E-02 8.17261240E-02-6.34186758E-05    3
 2.61652778E-08-4.48235476E-12-4.78894119E+03 3.14031132E+01                   4
c2h3coc4h8-3 4/15/9THERMc   7h  11o   1     0G   300.000  5000.000 1380.000    51
 2.16171591E+01 2.55348372E-02-8.67346499E-06 1.34131531E-09-7.76387462E-14    2
-1.01409871E+04-8.03654398E+01 1.10853774E+00 7.02837088E-02-4.50424665E-05    3
 1.44399473E-08-1.84448557E-12-2.69659961E+03 3.09129641E+01                   4
c2h3coc5h11 4/15/9 THERMc   8h  14o   1     0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.50468172E+01 3.31391031E-02-1.14482905E-05 1.78916517E-09-1.04278029E-13    2
-3.78700449E+04-1.00708263E+02-6.11156110E-02 9.10996690E-02-6.38424556E-05    3
 2.40124190E-08-3.82997089E-12-2.89327049E+04 3.46321414E+01                   4
c2h3coc5h10-5 4/15/9THERc   8h  13o   1     0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.63460968E+01 2.96842072E-02-1.03013463E-05 1.61490694E-09-9.43278503E-14    2
-1.67755921E+04-1.07661304E+02-1.27720569E-01 9.37381419E-02-7.13979316E-05    3
 2.89246821E-08-4.87854838E-12-7.68420465E+03 3.39356643E+01                   4
c2h3coc5h10-4 4/15/9THERc   8h  13o   1     0G   300.000  5000.000 1383.000    61
 2.47133948E+01 3.01318603E-02-1.02589501E-05 1.58863625E-09-9.20289844E-14    2
-1.42073438E+04-9.55434817E+01 8.47277192E-01 8.26711000E-02-5.36351605E-05    3
 1.76065702E-08-2.33388782E-12-5.58052363E+03 3.38039442E+01                   4
c2h3coc6h13 4/15/9 THERMc   9h  16o   1     0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.82126657E+01 3.76372508E-02-1.29934448E-05 2.02973390E-09-1.18262347E-13    2
-4.19677669E+04-1.16284696E+02-2.47881926E-01 1.03125042E-01-7.18336141E-05    3
 2.67723821E-08-4.22495392E-12-3.18273043E+04 3.71832891E+01                   4
c2h3coc6h12-6 4/15/9THERc   9h  15o   1     0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.95082162E+01 3.41896343E-02-1.18498689E-05 1.85608662E-09-1.08351058E-13    2
```

```
-2.08722628E+04-1.23217680E+02-3.11680126E-01 1.05753396E-01-7.93787862E-05    3
 3.16823141E-08-5.27380726E-12-1.05792774E+04 3.64734004E+01                   4
c2h3coc6h12-5 4/15/9THERc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    71
 2.82304677E+01 3.41043206E-02-1.15796384E-05 1.79022138E-09-1.03600366E-13    2
-1.84472170E+04-1.13108518E+02 5.45344018E-01 9.50191613E-02-6.16874215E-05    3
 2.01426108E-02-2.63599843E-12-8.45419002E+03 3.69195672E+01                   4
! Base C9
nc9h20      Burcat      c   9h  20o   0     G   0200.00   6000.00  1000.00     1
 2.55877522E+01 4.60770651E-02-1.60860633E-05 2.58274408E-09-1.54734690E-13    2
-4.00748448E+04-1.04722466E+02 1.39840225E+01-1.17224978E-02 2.52316467E-04    3
-3.25680364E-07 1.29109135E-10-3.28258409E+04-2.38633750E+01-2.75309838E+04    4
Ac9h19     Burcat       c   9h  19o   0     G   0200.00   6000.00  1000.00     1
 2.10145145E+01 5.18616211E-02-1.89952568E-05 3.11574043E-09-1.88328529E-13    2
-1.50809093E+04-7.60093216E+01 1.33309614E+01-2.35843645E-03 2.15714140E-04    3
-2.81626719E-07 1.11748345E-10-9.72551279E+03-1.91378729E+01-4.45365993E+03    4
Bc9h19                  c   9h  19o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17096243E+02 0.54549702E-01-0.18069100E-04 0.28318998E-08-0.17247326E-12    2
-0.12724994E+05-0.53264206E+02-0.21709469E+00 0.10039195E+00-0.51627532E-04    3
 0.17086611E-08 0.60214628E-11-0.81046172E+04 0.36094986E+02                   4
Cc9h19                  c   9h  19o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17309231E+02 0.54121740E-01-0.17874010E-04 0.27970348E-08-0.17025693E-12    2
-0.12759730E+05-0.54338570E+02-0.10298499E+01 0.10617688E+00-0.64349602E-04    3
 0.13055704E-07 0.23631156E-11-0.80276958E+04 0.39473068E+02                   4
Dc9h19                  c   9h  19o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17309231E+02 0.54121740E-01-0.17874010E-04 0.27970348E-08-0.17025693E-12    2
-0.12759730E+05-0.54338570E+02-0.10298499E+01 0.10617688E+00-0.64349602E-04    3
 0.13055704E-07 0.23631156E-11-0.80276958E+04 0.39473068E+02                   4
Ec9h19                  c   9h  19o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17309231E+02 0.54121740E-01-0.17874010E-04 0.27970348E-08-0.17025693E-12    2
-0.12759730E+05-0.55031647E+02-0.10298499E+01 0.10617688E+00-0.64349602E-04    3
 0.13055704E-07 0.23631156E-11-0.80276958E+04 0.38779991E+02                   4
c9h18-1 1-nonene  T 3/00c   9h  18    0    0G    300.000  5000.000 1000.      1
 0.23648630E+02 0.42839661E-01-0.13811799E-04 0.21258086E-08-0.12798081E-12    2
-0.24007359E+05-0.92640266E+02-0.98635113E+00 0.98924667E-01-0.52890089E-04    3
 0.77450908E-08 0.18599660E-11-0.16191196E+05 0.38616222E+02                   4
c9h18-2     THERGAS     c   9h  18    0    0G    300.000  5000.000 1000.000    1
 0.23464685E+02 0.42809591E-01-0.13739379E-04 0.21046211E-08-0.12611961E-12    2
-0.25380301E+05-0.92049950E+02-0.97349174E-01 0.94949417E-01-0.49503888E-04    3
 0.80844371E-08 0.10590433E-11-0.17698664E+05 0.34163700E+02                   4
c9h18-3     THERGAS     c   9h  18    0    0G    300.000  5000.000 1000.000    1
 0.23403933E+02 0.42996075E-01-0.13837616E-04 0.21245410E-08-0.12755180E-12    2
-0.25400660E+05-0.91882317E+02-0.12577512E+01 0.99013269E-01-0.53231106E-04    3
 0.85398444E-08 0.14724235E-11-0.17540232E+05 0.39615685E+02                   4
c9h18-4     THERGAS     c   9h  18    0    0G    300.000  5000.000 1000.000    1
 0.23347437E+02 0.43096352E-01-0.13896452E-04 0.21384670E-08-0.12869747E-12    2
-0.25378199E+05-0.91567986E+02-0.11010473E+01 0.97916387E-01-0.50575127E-04    3
 0.58723453E-08 0.24206520E-11-0.17556848E+05 0.38953510E+02                   4
Cc9h17-1                c   9h  17o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24537655E+02 0.38139250E-01-0.11394887E-04 0.16621738E-08-0.96505838E-13    2
-0.82738047E+04-0.97115593E+02-0.60456407E+00 0.97226202E-01-0.58194728E-04    3
 0.15641350E-07-0.12267471E-11-0.34386041E+03 0.36496502E+02                   4
Dc9h17-2    THERGAS     c   9h  17o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24300171E+02 0.38137496E-01-0.11336612E-04 0.16446871E-08-0.94975351E-13    2
-0.10128188E+05-0.96444168E+02 0.46289793E+00 0.92514515E-01-0.54073487E-04    3
 0.15827760E-07-0.20867368E-11-0.23812151E+04 0.30979557E+02                   4
Ec9h17-3    THERGAS     c   9h  17o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24209284E+02 0.38376037E-01-0.11464733E-04 0.16719176E-08-0.97037063E-13    2
-0.10135658E+05-0.96158936E+02-0.68866998E+00 0.96552916E-01-0.57789883E-04    3
 0.16307295E-07-0.16912565E-11-0.22244277E+04 0.36335827E+02                   4
Fc9h17-4    THERGAS     c   9h  17o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24202337E+02 0.38386844E-01-0.11470256E-04 0.16730783E-08-0.97123346E-13    2
-0.10131787E+05-0.96800568E+02-0.10817566E+01 0.99279627E-01-0.64334956E-04    3
 0.22834289E-07-0.39992410E-11-0.21823948E+04 0.37317131E+02                   4
c9h16                   c   9h  16o   0     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12603670E+02 0.26696790E-01-0.88122661E-05 0.13779865E-08-0.83808537E-13    2
-0.30240355E+05-0.34318184E+02 0.33559802E+01 0.44081770E-01-0.87931503E-05    3
-0.13929200E-07 0.70754257E-11-0.27296576E+05 0.15480649E+02                   4
c9h19qjA   Thergas       c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29181751E+02 0.43400299E-01-0.12959443E-04 0.18844553E-08-0.10889628E-12    2
-0.33375445E+05-0.11554530E+03-0.87561017E+00 0.11901104E+00-0.78198158E-04    3
 0.23496838E-07-0.20496937E-11-0.24392154E+05 0.42373283E+02                   4
c9h19qjB                c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25951220E+02 0.48708454E-01-0.15289610E-04 0.23051367E-08-0.13661580E-12    2
-0.34395867E+05-0.97621887E+02 0.45977383E+01 0.82192063E-01 0.13117477E-04    3
-0.69661475E-07 0.31383320E-10-0.27565555E+05 0.18304462E+02                   4
c9h19qjC                c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25917749E+02 0.48768431E-01-0.15325058E-04 0.23135645E-08-0.13731098E-12    2
-0.34110555E+05-0.97436218E+02 0.44519591E+01 0.83205208E-01 0.10679204E-04    3
-0.67224029E-07 0.30519677E-10-0.27278244E+05 0.18920250E+02                   4
c9h19qjD                c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25917749E+02 0.48768431E-01-0.15325058E-04 0.23135645E-08-0.13731098E-12    2
-0.34110551E+05-0.97436684E+02 0.44519591E+01 0.83205208E-01 0.10679204E-04    3
-0.67224029E-07 0.30519677E-10-0.27278242E+05 0.18919788E+02                   4
c9h19qjE                c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25917749E+02 0.48768431E-01-0.15325058E-04 0.23135645E-08-0.13731098E-12    2
-0.34110551E+05-0.98129898E+02 0.44519591E+01 0.83205208E-01 0.10679204E-04    3
-0.67224029E-07 0.30519677E-10-0.27278242E+05 0.18226576E+02                   4
c9h18rAqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26344187E+02 0.46850391E-01-0.14368175E-04 0.21348647E-08-0.12549568E-12    2
-0.27934818E+05-0.95220055E+02 0.52131855E+ 0.1178519900E+00-0.81049620E-04    3
 0.24465434E-07-0.92238229E-12-0.20808869E+05 0.38252827E+02                   4
c9h18rBqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26368946E+02 0.46831865E-01-0.14363258E-04 0.21343007E-08-0.12547133E-12    2
-0.26077926E+05-0.95349937E+02 0.50118494E+00 0.11802722E+00-0.81265382E-04    3
 0.24508493E-07-0.89410424E-12-0.18946953E+05 0.38328033E+02                   4
c9h18rCqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26368946E+02 0.46831865E-01-0.14363258E-04 0.21343007E-08-0.12547133E-12    2
-0.26077926E+05-0.95349937E+02 0.50118494E+00 0.11802722E+00-0.81265382E-04    3
 0.24508493E-07-0.89410424E-12-0.18946953E+05 0.38328033E+02                   4
c9h18rDqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26368946E+02 0.46831865E-01-0.14363258E-04 0.21343007E-08-0.12547133E-12    2
-0.26077926E+05-0.95349937E+02 0.50118494E+00 0.11802722E+00-0.81265382E-04    3
 0.24508493E-07-0.89410424E-12-0.18946953E+05 0.38328033E+02                   4
c9h18rEqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26473988E+02 0.46643920E-01-0.14252324E-04 0.21079569E-08-0.12330019E-12    2
-0.26119617E+05-0.95934296E+02 0.39279738E+00 0.11877508E+00-0.83053557E-04    3
 0.26286820E-07-0.15216977E-11-0.18935293E+05 0.38787628E+02                   4
c9h18rFqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26473988E+02 0.46643920E-01-0.14252324E-04 0.21079569E-08-0.12330019E-12    2
-0.26119617E+05-0.95934296E+02 0.39279738E+00 0.11877508E+00-0.83053557E-04    3
 0.26286820E-07-0.15216977E-11-0.18935293E+05 0.38787628E+02                   4
c9h18rGqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26473988E+02 0.46643920E-01-0.14252324E-04 0.21079569E-08-0.12330019E-12    2
-0.26119617E+05-0.95934296E+02 0.39279738E+00 0.11877508E+00-0.83053557E-04    3
 0.26286820E-07-0.15216977E-11-0.18935293E+05 0.38787628E+02                   4
c9h18rHqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26239941E+02 0.47101047E-01-0.14460212E-04 0.21459561E-08-0.12581522E-12    2
-0.26074791E+05-0.94737976E+02 0.11575696E+01 0.11331352E+00-0.71085407E-04    3
 0.15671091E-07 0.18845383E-11-0.19006945E+05 0.35614079E+02                   4
c9h18rIqA               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26777912E+02 0.46715908E-01-0.14357254E-04 0.21344824E-08-0.12541393E-12    2
-0.25170102E+05-0.97914711E+02 0.51517880E+00 0.11698255E+00-0.76151468E-04    3
```

```
 0.18659977E-07 0.11665074E-11-0.17832375E+05 0.38300812E+02                   4
c9h18rAqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26860716E+02 0.46836983E-01-0.14441613E-04 0.21527566E-08-0.12676073E-12    2
-0.27913566E+05-0.98685249E+02 0.47733593E+01 0.89312449E-01-0.90003341E-05    3
-0.47773110E-07 0.24076892E-10-0.21236963E+05 0.19283745E+02                   4
c9h18rBqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25970720E+02 0.47265381E-01-0.14515322E-04 0.21566009E-08-0.12664800E-12    2
-0.31153859E+05-0.93794388E+02 0.54415913E+01 0.86477503E-01-0.84065723E-05    3
-0.45665825E-07 0.23026124E-10-0.24941992E+05 0.15901926E+02                   4
c9h18rCqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28480822E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21979354E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rDqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28480822E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21979354E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rEqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28480822E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21979354E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rFqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28480822E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21979354E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rGqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28480822E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21979354E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rHqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26232813E+02 0.47381770E-01-0.14638063E-04 0.21862689E-08-0.12896644E-12    2
-0.28430477E+05-0.95008713E+02 0.57525477E+01 0.83322354E-01 0.16063391E-05    3
-0.56261570E-07 0.26731959E-10-0.22095531E+05 0.15168555E+02                   4
c9h18rIqB               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26861151E+02 0.46832934E-01-0.14437405E-04 0.21513935E-08-0.12662346E-12    2
-0.27561406E+05-0.98687531E+02 0.51266885E+01 0.86858250E-01-0.30980741E-05    3
-0.53669378E-07 0.26164716E-10-0.20922457E+05 0.17787926E+02                   4
c9h18rAqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26861151E+02 0.46832934E-01-0.14437405E-04 0.21513935E-08-0.12662346E-12    2
-0.27289664E+05-0.98687531E+02 0.51266885E+01 0.86858250E-01-0.30980741E-05    3
-0.53669378E-07 0.26164716E-10-0.20650715E+05 0.17787926E+02                   4
c9h18rBqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26232813E+02 0.47381770E-01-0.14638063E-04 0.21862689E-08-0.12896644E-12    2
-0.28158736E+05-0.95008713E+02 0.57525477E+01 0.83322354E-01 0.16063391E-05    3
-0.56261570E-07 0.26731959E-10-0.21823791E+05 0.15168555E+02                   4
c9h18rCqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26235876E+02 0.46750482E-01-0.14272105E-04 0.21099424E-08-0.12340037E-12    2
-0.30938143E+05-0.95160652E+02 0.42163682E+01 0.95128782E-01-0.28024398E-04    3
-0.27428543E-07 0.16927680E-10-0.24549281E+05 0.21025965E+02                   4
c9h18rDqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28209082E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21707613E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rEqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28209082E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21707613E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rFqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52176769E+02 0.99439938E-02-0.12386784E-05 0.90972098E-10-0.32409115E-14    2
-0.39322594E+05-0.24274733E+03 0.10758094E+01 0.11839948E+00-0.89050838E-04    3
 0.41901604E-07-0.11340823E-10-0.21363797E+05 0.34593719E+02                   4
```

```
c9h18rGqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28209082E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21707613E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rHqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26232813E+02 0.47381770E-01-0.14638063E-04 0.21862689E-08-0.12896644E-12    2
-0.28158736E+05-0.95008713E+02 0.57525477E+01 0.83322354E-01 0.16063391E-05    3
-0.56261570E-07 0.26731959E-10-0.21823791E+05 0.15168555E+02                   4
c9h18rIqC               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26861151E+02 0.46832934E-01-0.14437405E-04 0.21513935E-08-0.12662346E-12    2
-0.27289664E+05-0.98687531E+02 0.51266885E+01 0.86858250E-01-0.30980741E-05    3
-0.53669378E-07 0.26164716E-10-0.20650715E+05 0.17787926E+02                   4
c9h18rAqD               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26861151E+02 0.46832934E-01-0.14437405E-04 0.21513935E-08-0.12662346E-12    2
-0.27289664E+05-0.98687531E+02 0.51266885E+01 0.86858250E-01-0.30980741E-05    3
-0.53669378E-07 0.26164716E-10-0.20650715E+05 0.17787926E+02                   4
c9h18rBqE               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26232813E+02 0.47381770E-01-0.14638063E-04 0.21862689E-08-0.12896644E-12    2
-0.28158736E+05-0.95008713E+02 0.57525477E+01 0.83322354E-01 0.16063391E-05    3
-0.56261570E-07 0.26731959E-10-0.21823791E+05 0.15168555E+02                   4
c9h18rCqE               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28209082E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21707613E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rDqE               c   9h  19o   2     G   0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.26483135E+02 0.46894185E-01-0.14411439E-04 0.21436999E-08-0.12606752E-12    2
-0.28209082E+05-0.96293015E+02 0.45698047E+01 0.91696084E-01-0.17385441E-04    3
-0.38612189E-07 0.20830029E-10-0.21707613E+05 0.20110281E+02                   4
c9h18rEqE             c   9h  19o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.26235876E+02 0.46750482E-01-0.14272105E-04 0.21099424E-08-0.12340037E-12    2
-0.30938143E+05-0.95853737E+02 0.42163682E+01 0.95128782E-01-0.28024398E-04    3
-0.27428543E-07 0.16927680E-10-0.24549281E+05 0.20332882E+02                   4
c9h18qjAqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30955120E+02 0.46759646E-01-0.14073647E-04 0.20612949E-08-0.11988045E-12    2
-0.47701555E+05-0.11806299E+03 0.35736973E+01 0.10041121E+00-0.87616290E-05    3
-0.59550999E-07 0.30002910E-10-0.39538074E+05 0.27780340E+02                   4
c9h18qjBqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31038488E+02 0.47735918E-01-0.14599507E-04 0.21608142E-08-0.12645493E-12    2
-0.45811762E+05-0.11696181E+03 0.64382296E+01 0.91654688E-01 0.26842943E-05    3
-0.65584040E-07 0.31110444E-10-0.38243316E+05 0.15182489E+02                   4
c9h18qjCqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30950647E+02 0.47892228E-01-0.14691514E-04 0.21826516E-08-0.12825572E-12    2
-0.45776859E+05-0.11647336E+03 0.66611009E+01 0.90105869E-01 0.64087008E-05    3
-0.69301954E-07 0.32425375E-10-0.38267113E+05 0.14238935E+02                   4
c9h18qjDqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30950647E+02 0.47892228E-01-0.14691514E-04 0.21826516E-08-0.12825572E-12    2
-0.45776859E+05-0.11647339E+03 0.66611009E+01 0.90105869E-01 0.64087008E-05    3
-0.69301954E-07 0.32425375E-10-0.38267113E+05 0.14238896E+02                   4
c9h18qjEqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31039066E+02 0.47737852E-01-0.14602389E-04 0.21618665E-08-0.12656736E-12    2
-0.45812902E+05-0.11696762E+03 0.66236506E+01 0.90364970E-01 0.57900734E-05    3
-0.68689793E-07 0.32210862E-10-0.38263105E+05 0.14397618E+02                   4
c9h18qjFqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31039066E+02 0.47737852E-01-0.14602389E-04 0.21618665E-08-0.12656736E-12    2
-0.45812930E+05-0.11696744E+03 0.66387191E+01 0.90262622E-01 0.60312573E-05    3
-0.68926539E-07 0.32293460E-10-0.38264750E+05 0.14333732E+02                   4
c9h18qjGqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31039066E+02 0.47737852E-01-0.14602389E-04 0.21618665E-08-0.12656736E-12    2
-0.45812746E+05-0.11696642E+03 0.65338249E+01 0.90982795E-01 0.43185801E-05    3
-0.67232605E-07 0.31698803E-10-0.38253418E+05 0.14779528E+02                   4
c9h18qjHqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30946157E+02 0.47899894E-01-0.14695902E-04 0.21836790E-08-0.12833965E-12    2
-0.46046379E+05-0.11644504E+03 0.64709330E+01 0.91416858E-01 0.32799835E-05    3
-0.66198226E-07 0.31333023E-10-0.38518395E+05 0.15047546E+02                   4
c9h18qjIqA            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30969017E+02 0.47590684E-01-0.14500595E-04 0.21391031E-08-0.12483095E-12    2
-0.43697547E+05-0.11557323E+03 0.21968551E+01 0.11917415E+00-0.64029431E-04    3
 0.34980713E-09 0.83943581E-11-0.35464016E+05 0.34825428E+02                   4
c9h18qjAqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31038488E+02 0.47735918E-01-0.14599507E-04 0.21608142E-08-0.12645493E-12    2
-0.45811762E+05-0.11696165E+03 0.64382296E+01 0.91654688E-01 0.26842943E-05    3
-0.65584040E-07 0.31110444E-10-0.38243316E+05 0.15182643E+02                   4
c9h18qjBqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28478655E+02 0.52160636E-01-0.16603331E-04 0.25318954E-08-0.15143767E-12    2
-0.48990281E+05-0.10673918E+03 0.36755686E+01 0.98876841E-01-0.19263166E-05    3
-0.67487122E-07 0.33383959E-10-0.41639961E+05 0.25495577E+02                   4
c9h18qjCqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49015227E+05-0.12634143E+03-0.17879112E+ 0.1375250500E+00-0.10058691E-03    3
 0.30320532E-07-0.49455242E-12-0.40111199E+05 0.42450077E+02                   4
c9h18qjDqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48954461E+05-0.12549796E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.40133562E+05 0.41570774E+02                   4
c9h18qjEqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48954461E+05-0.12480479E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.40133562E+05 0.42263935E+02                   4
c9h18qjFqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48954461E+05-0.12480455E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.40133562E+05 0.42264172E+02                   4
c9h18qjGqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48954461E+05-0.12480402E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.40133562E+05 0.42264709E+02                   4
c9h18qjHqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49287281E+05-0.12564702E+03 0.85392639E-04 0.13628313E+00-0.97601645E-04    3
 0.27340018E-07 0.56013858E-12-0.40402059E+05 0.42387978E+02                   4
c9h18qjIqB            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30976122E+02 0.47845777E-01-0.14663553E-04 0.21758919E-08-0.12769003E-12    2
-0.46058316E+05-0.11661455E+03 0.64937673E+01 0.91256864E-01 0.36685587E-05    3
-0.66590744E-07 0.31473633E-10-0.38520816E+05 0.14948297E+02                   4
c9h18qjAqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30976122E+02 0.47845777E-01-0.14663553E-04 0.21758919E-08-0.12769003E-12    2
-0.45786570E+05-0.11661391E+03 0.64937673E+01 0.91256864E-01 0.36685587E-05    3
-0.66590744E-07 0.31473633E-10-0.38249070E+05 0.14948941E+02                   4
c9h18qjBqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49015539E+05-0.12634012E+03 0.85392639E-04 0.13628313E+00-0.97601645E-04    3
 0.27340018E-07 0.56013858E-12-0.40130320E+05 0.41694889E+02                   4
c9h18qjCqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28478655E+02 0.52160636E-01-0.16603331E-04 0.25318954E-08-0.15143767E-12    2
-0.48990281E+05-0.10673949E+03 0.36755686E+01 0.98876841E-01-0.19263166E-05    3
-0.67487122E-07 0.33383959E-10-0.41639961E+05 0.25495277E+02                   4
c9h18qjDqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549796E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41570774E+02                   4
c9h18qjEqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549788E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41570850E+02                   4
c9h18qjFqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549763E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571098E+02                   4
c9h18qjGqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549710E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571625E+02                   4
c9h18qjHqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49015539E+05-0.12634012E+03 0.85392639E-04 0.13628313E+00-0.97601645E-04    3
 0.27340018E-07 0.56013858E-12-0.40130320E+05 0.41694889E+02                   4
c9h18qjIqC            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30976122E+02 0.47845777E-01-0.14663553E-04 0.21758919E-08-0.12769003E-12    2
-0.45786570E+05-0.11592143E+03 0.64937673E+01 0.91256864E-01 0.36685587E-05    3
-0.66590744E-07 0.31473633E-10-0.38249070E+05 0.15641458E+02                   4
c9h18qjAqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30976122E+02 0.47845777E-01-0.14663553E-04 0.21758919E-08-0.12769003E-12    2
-0.45786570E+05-0.11661414E+03 0.64937673E+01 0.91256864E-01 0.36685587E-05    3
-0.66590744E-07 0.31473633E-10-0.38249070E+05 0.14948711E+02                   4
c9h18qjBqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49015539E+05-0.12634012E+03 0.85392639E-04 0.13628313E+00-0.97601645E-04    3
 0.27340018E-07 0.56013858E-12-0.40130320E+05 0.41694889E+02                   4
c9h18qjCqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549710E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571625E+02                   4
c9h18qjDqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549763E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571091E+02                   4
c9h18qjEqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549710E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571625E+02                   4
c9h18qjFqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32579189E+02 0.46041515E-01-0.13945423E-04 0.20496949E-08-0.11938095E-12    2
-0.49015539E+05-0.12634012E+03 0.85392639E-04 0.13628313E+00-0.97601645E-04    3
 0.27340018E-07 0.56013858E-12-0.40130320E+05 0.41694889E+02                   4
c9h18qjGqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549710E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571625E+02                   4
c9h18qjHqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32427872E+02 0.46308927E-01-0.14101534E-04 0.20864421E-08-0.12238879E-12    2
-0.48682723E+05-0.12549763E+03 0.28376672E-01 0.13610221E+00-0.97205222E-04    3
 0.26980851E-07 0.67551721E-12-0.39861824E+05 0.41571098E+02                   4
c9h18qjIqD            c   9h  19o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28478655E+02 0.52160636E-01-0.16603331E-04 0.25318954E-08-0.15143767E-12    2
-0.48990230E+05-0.10743262E+03 0.36454315E+01 0.99081539E-01-0.24086924E-05    3
-0.67013609E-07 0.33218761E-10-0.41636668E+05 0.24930279E+02                   4
c9h18o-AB    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54220787E+02 0.37295849E-02-0.28925851E-06 0.21969595E-10-0.12185279E-14    2
-0.50935039E+05-0.26627145E+03 0.68511850E+00 0.95176205E-01-0.38116545E-04    3
-0.13301055E-08 0.12650430E-11-0.30428816E+05 0.31140984E+02                   4
c9h18o-BC    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25491837E+02 0.45432143E-01-0.15068784E-04 0.23655131E-08-0.14431800E-12    2
-0.41008820E+05-0.10371906E+03-0.19395231E+01 0.11144988E+00-0.64520078E-04    3
 0.10974392E-07 0.20857151E-11-0.32700787E+05 0.41050835E+02                   4
c9h18o-CD    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25505743E+02 0.45400590E-01-0.15042233E-04 0.23578521E-08-0.14361246E-12    2
-0.40742336E+05-0.10379461E+03-0.19177125E+01 0.11129976E+00-0.64161504E-04    3
 0.10616990E-07 0.22125674E-11-0.32431400E+05 0.40958286E+02                   4
c9h18o-DE    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.25505743E+02 0.45400590E-01-0.15042233E-04 0.23578521E-08-0.14361246E-12    2
-0.40742336E+05-0.10379461E+03-0.19177125E+01 0.11129976E+00-0.64161504E-04    3
 0.10616990E-07 0.22125674E-11-0.32431400E+05 0.40958286E+02                   4
c9h18o#3              c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.20751516E+02 0.53109169E-01-0.18619254E-04 0.30372509E-08-0.19015993E-12    2
-0.39084238E+05-0.77091675E+02-0.10779630E+01 0.10479561E+00-0.46471647E-04    3
-0.95035428E-08 0.10340567E-10-0.32784797E+05 0.37488365E+02                   4
c9h18o-AC    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.57455284E+02 0.12881232E-02-0.74070044E-07 0.10913942E-10-0.86161870E-15    2
-0.53998305E+05-0.28827087E+03 0.50904173E+00 0.87393589E-01-0.21114171E-04    3
-0.99423492E-08 0.18286752E-11-0.30969023E+05 0.32374821E+02                   4
c9h18o-BD    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52760944E+02 0.18693563E+00-0.91526992E-04 0.18906691E-07-0.14010413E-11    2
-0.12941102E+05 0.32632043E+03-0.69649191E+01 0.13153690E+00-0.96453827E-04    3
 0.29377718E-07 0.18053954E-11-0.32654527E+05 0.63542870E+02                   4
c9h18o-CE    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52652420E+02 0.18672647E+00-0.91404036E-04 0.18878158E-07-0.13987504E-11    2
-0.12707204E+05 0.32572830E+03-0.71477265E+01 0.13281809E+00-0.99568366E-04    3
 0.32526632E-07 0.67628482E-12-0.32363393E+05 0.64315308E+02                   4
c9h18o-DF    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52652420E+02 0.18672647E+00-0.91404036E-04 0.18878158E-07-0.13987504E-11    2
-0.12707204E+05 0.32434213E+03-0.71477265E+01 0.13281809E+00-0.99568366E-04    3
 0.32526632E-07 0.67628482E-12-0.32363393E+05 0.62929146E+02                   4
c9h18o#4              c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12834952E+02 0.68842724E-01-0.26673071E-04 0.46667958E-08-0.30677422E-12    2
-0.37490941E+05-0.36652031E+02-0.93998842E+01 0.15012281E+00-0.14627981E-03    3
 0.85317865E-07-0.20543556E-10-0.32142646E+05 0.73639565E+02                   4
c9h18o-AD    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.57717716E+02 0.98878564E-03 0.34258424E-07-0.13545402E-10 0.11424654E-14    2
-0.62769398E+05-0.28943927E+03 0.71783710E+00 0.10049052E+00-0.44562908E-04    3
 0.13336982E-08 0.74469841E-12-0.41140188E+05 0.26463823E+02                   4
c9h18o-BE    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11436962E+02 0.11087813E+00-0.48648802E-04 0.92896082E-08-0.64978827E-12    2
-0.36877254E+05 0.98911888E+02-0.41417184E+01 0.12932250E+00-0.91954826E-04    3
 0.23489365E-07 0.24961882E-11-0.43138477E+05 0.46207027E+02                   4
c9h18o-CF    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11436962E+02 0.11087813E+00-0.48648802E-04 0.92896082E-08-0.64978827E-12    2
-0.36605512E+05 0.98911888E+02-0.41417184E+01 0.12932250E+00-0.91954826E-04    3
 0.23489365E-07 0.24961882E-11-0.42866738E+05 0.46207027E+02                   4
c9h18o#5              c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21920916E+02 0.53503696E-01-0.19128767E-04 0.31637077E-08-0.19998517E-12    2
-0.50216125E+05-0.86968925E+02-0.48857079E+01 0.13500465E+00-0.10717843E-03    3
 0.40542766E-07-0.42895635E-11-0.43336945E+05 0.49291260E+02                   4
c9h18o#6              c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21920916E+02 0.53503696E-01-0.19128767E-04 0.31637077E-08-0.19998517E-12    2
-0.52661785E+05-0.89686325E+02-0.48857079E+01 0.13500465E+00-0.10717843E-03    3
 0.40542766E-07-0.42895635E-11-0.45782605E+05 0.46573860E+02                   4
c9h18o-AE    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.57717716E+02 0.98878564E-03 0.34258424E-07-0.13545402E-10 0.11424654E-14    2
-0.65486801E+05-0.29215668E+03 0.71783710E+00 0.10049052E+00-0.44562908E-04    3
 0.13336982E-08 0.74469841E-12-0.43857590E+05 0.23746424E+02                   4
c9h18o-BF    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11436962E+02 0.11087813E+00-0.48648802E-04 0.92896082E-08-0.64978827E-12    2
-0.39594656E+05 0.96194489E+02-0.41417184E+01 0.12932250E+00-0.91954826E-04    3
 0.23489365E-07 0.24961882E-11-0.45855879E+05 0.43489628E+02                   4
c9h18o-CG    THERGAS    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11436962E+02 0.11087813E+00-0.48648802E-04 0.92896082E-08-0.64978827E-12    2
-0.39322914E+05 0.96194489E+02-0.41417184E+01 0.12932250E+00-0.91954826E-04    3
 0.23489365E-07 0.24961882E-11-0.45584137E+05 0.43489628E+02                   4
c9h19qA   THERGAS       c   9h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.28012716E+02 0.48133329E-01-0.15355894E-04 0.23437927E-08-0.14018776E-12    2
-0.50686820E+05-0.10751595E+03 0.55414140E+00 0.11442371E+00-0.65771113E-04    3
 0.12139529E-07 0.16232346E-11-0.42369977E+05 0.37372299E+02                   4
c9h19qB   THERGAS      c   9h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52552689E+02 0.12292847E-01-0.18977114E-05 0.16954796E-09-0.71385548E-14    2
-0.63541996E+05-0.24733365E+03 0.23825750E+01 0.10538419E+00-0.48774335E-04    3
 0.22046358E-08 0.19078454E-11-0.45183777E+05 0.28419085E+02                   4
c9h19qC   THERGAS      c   9h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52552689E+02 0.12292847E-01-0.18977114E-05 0.16954796E-09-0.71385548E-14    2
-0.63270254E+05-0.24733365E+03 0.23825750E+01 0.10538419E+00-0.48774335E-04    3
 0.22046358E-08 0.19078454E-11-0.44912039E+05 0.28419085E+02                   4
c9h19qD   THERGAS      c   9h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52552689E+02 0.12292847E-01-0.18977114E-05 0.16954796E-09-0.71385548E-14    2
-0.63270254E+05-0.24733365E+03 0.23825750E+01 0.10538419E+00-0.48774335E-04    3
 0.22046358E-08 0.19078454E-11-0.44912039E+05 0.28419085E+02                   4
c9h19qE   THERGAS      c   9h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52552689E+02 0.12292847E-01-0.18977114E-05 0.16954796E-09-0.71385548E-14    2
-0.63270254E+05-0.24802672E+03 0.23825750E+01 0.10538419E+00-0.48774335E-04    3
 0.22046358E-08 0.19078454E-11-0.44912039E+05 0.27726002E+02                   4
c9h19ojA  THERGAS      c   9h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25889626E+02 0.44678904E-01-0.13621532E-04 0.20147730E-08-0.11803363E-12    2
-0.32146812E+05-0.10098331E+03-0.23493445E+01 0.11539201E+00-0.75087053E-04    3
 0.23345649E-07-0.24685802E-11-0.23638500E+05 0.47581589E+02                   4
c9h19ojB  THERGAS      c   9h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49356236E+02 0.11019588E-01-0.15292540E-05 0.12519824E-09-0.49643038E-14    2
-0.43574855E+05-0.23497281E+03-0.22032407E+00 0.10426953E+00-0.53089923E-04    3
 0.84217033E-08-0.41878615E-12-0.25427736E+05 0.37358292E+02                   4
c9h19ojC  THERGAS      c   9h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49356236E+02 0.11019588E-01-0.15292540E-05 0.12519824E-09-0.49643038E-14    2
-0.43303039E+05-0.23497423E+03-0.26552942E+00 0.10457657E+00-0.53813488E-04    3
 0.91319636E-08-0.66658408E-12-0.25151055E+05 0.37549084E+02                   4
c9h19ojD  THERGAS      c   9h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49356236E+02 0.11019588E-01-0.15292540E-05 0.12519824E-09-0.49643038E-14    2
-0.43303195E+05-0.23497520E+03-0.17580587E+00 0.10395946E+00-0.52343661E-04    3
 0.76764293E-08-0.15510724E-12-0.25160732E+05 0.37167831E+02                   4
c9h19ojE  THERGAS      c   9h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49356236E+02 0.11019588E-01-0.15292540E-05 0.12519824E-09-0.49643038E-14    2
-0.43303195E+05-0.23566843E+03-0.17580587E+00 0.10395946E+00-0.52343661E-04    3
 0.76764293E-08-0.15510724E-12-0.25160732E+05 0.36474602E+02                   4
c9h17oAqB   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.57564270E+02 0.47556795E-02-0.34552519E-06 0.11218278E-10 0.10192661E-15    2
-0.74547703E+05-0.27205838E+03 0.34202495E+01 0.10238295E+00-0.47393198E-04    3
 0.24588380E-08 0.11120346E-11-0.54369055E+05 0.26757969E+02                   4
c9h17oAqC   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.99868307E+01 0.76582126E-01-0.29372020E-04 0.51015396E-08-0.33358011E-12    2
-0.55248777E+05-0.22507935E+01 0.12709715E+01 0.11825272E+00-0.78076853E-04    3
 0.18621957E-07 0.18200452E-11-0.54944102E+05 0.35592842E+02                   4
c9h17oAqD   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10022679E+02 0.76522343E-01-0.29341363E-04 0.50951545E-08-0.33310862E-12    2
-0.55263305E+05-0.24515686E+01 0.11904956E+01 0.11880637E+00-0.79394660E-04    3
 0.19925789E-07 0.13622130E-11-0.54935426E+05 0.35934254E+02                   4
c9h17oAqE   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10022679E+02 0.76522343E-01-0.29341363E-04 0.50951545E-08-0.33310862E-12    2
-0.55263305E+05-0.24515686E+01 0.11904956E+01 0.11880637E+00-0.79394660E-04    3
 0.19925789E-07 0.13622130E-11-0.54935426E+05 0.35934254E+02                   4
c9h17oBqA   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.99080772E+01 0.75885788E-01-0.28897963E-04 0.49948157E-08-0.32552468E-12    2
-0.56139234E+05-0.18210754E+01 0.19086102E+01 0.11480793E+00-0.76394666E-04    3
 0.20878485E-07 0.29800926E-12-0.55864230E+05 0.32813053E+02                   4
c9h17oBqC   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52639149E+02 0.10751194E-01-0.15841994E-05 0.13627209E-09-0.55901312E-14    2
```

```
-0.75996617E+05-0.24420425E+03 0.25104384E+01 0.10552572E+00-0.52689385E-04    3
 0.57669118E-08 0.82112529E-12-0.57793113E+05 0.30767122E+02                   4
c9h17oBqD   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11327724E+02 0.74158520E-01-0.28150040E-04 0.48553628E-08-0.31601127E-12    2
-0.59477828E+05-0.10366516E+02 0.81986332E+00 0.11904002E+00-0.80284874E-04    3
 0.21951815E-07 0.28604208E-12-0.58426965E+05 0.37555798E+02                   4
c9h17oBqE   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11550725E+02 0.73779374E-01-0.27955592E-04 0.48148165E-08-0.31300516E-12    2
-0.59567000E+05-0.11613739E+02 0.11634083E+01 0.11666089E+00-0.74588497E-04    3
 0.16294116E-07 0.22758696E-11-0.58463738E+05 0.36100586E+02                   4
c9h17oBqF   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11550725E+02 0.73779374E-01-0.27955592E-04 0.48148165E-08-0.31300516E-12    2
-0.59567000E+05-0.11613739E+02 0.11634083E+01 0.11666089E+00-0.74588497E-04    3
 0.16294116E-07 0.22758696E-11-0.58463738E+05 0.36100586E+02                   4
c9h17oCqA   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26330712E+01 0.88236339E-01-0.35123732E-04 0.62633991E-08-0.41729909E-12    2
-0.53882910E+05 0.39012688E+02 0.10333081E+01 0.11793247E+00-0.78747551E-04    3
 0.19317822E-07 0.19547415E-11-0.56327953E+05 0.37234768E+02                   4
c9h17oCqB   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20427570E+01 0.90380341E-01-0.36406032E-04 0.65445089E-08-0.43841737E-12    2
-0.55231008E+05 0.41258247E+02-0.58227444E+00 0.12484038E+00-0.85723135E-04    3
 0.21424613E-07 0.20497033E-11-0.57614609E+05 0.44007767E+02                   4
c9h17oCqD   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20427570E+01 0.90380341E-01-0.36406032E-04 0.65445089E-08-0.43841737E-12    2
-0.55231004E+05 0.41258247E+02-0.58227444E+00 0.12484038E+00-0.85723135E-04    3
 0.21424613E-07 0.20497033E-11-0.57614605E+05 0.44007767E+02                   4
c9h17oCqE   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16393070E+01 0.96133098E-01-0.39269718E-04 0.71291089E-08-0.48091864E-12    2
-0.54401484E+05 0.62303436E+02 0.51356161E+00 0.12245560E+00-0.85823747E-04    3
 0.23110351E-07 0.14885884E-11-0.58586809E+05 0.38567001E+02                   4
c9h17oCqF   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17773372E+01 0.96376061E-01-0.39404909E-04 0.71595063E-08-0.48331640E-12    2
-0.54347301E+05 0.63071304E+02 0.65579349E+00 0.12146684E+00-0.83440347E-04    3
 0.20720394E-07 0.23389231E-11-0.58602008E+05 0.37964905E+02                   4
c9h17oCqG   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17773372E+01 0.96376061E-01-0.39404909E-04 0.71595063E-08-0.48331640E-12    2
-0.54347301E+05 0.63071304E+02 0.65579349E+00 0.12146684E+00-0.83440347E-04    3
 0.20720394E-07 0.23389231E-11-0.58602008E+05 0.37964905E+02                   4
c9h17oDqA   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26330712E+01 0.88236339E-01-0.35123732E-04 0.62633991E-08-0.41729909E-12    2
-0.53882910E+05 0.39012688E+02 0.10333081E+01 0.11793247E+00-0.78747551E-04    3
 0.19317822E-07 0.19547415E-11-0.56327953E+05 0.37234768E+02                   4
c9h17oDqB   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16393070E+01 0.96133098E-01-0.39269718E-04 0.71291089E-08-0.48091864E-12    2
-0.54673227E+05 0.62303436E+02 0.51356161E+00 0.12245560E+00-0.85823747E-04    3
 0.23110351E-07 0.14885884E-11-0.58585551E+05 0.38567001E+02                   4
c9h17oDqC   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20427570E+01 0.90380341E-01-0.36406032E-04 0.65445089E-08-0.43841737E-12    2
-0.55231008E+05 0.41258247E+02-0.58227444E+00 0.12484038E+00-0.85723135E-04    3
 0.21424613E-07 0.20497033E-11-0.57614609E+05 0.44007767E+02                   4
c9h17oDqE   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21169822E+01 0.90259723E-01-0.36359546E-04 0.65385501E-08-0.43824422E-12    2
-0.55259289E+05 0.40843750E+02-0.32865819E+00 0.12310668E+00-0.81626393E-04    3
 0.17406423E-07 0.34464382E-11-0.57642086E+05 0.42930302E+02                   4
c9h17oDqF   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17223836E+01 0.96284375E-01-0.39364371E-04 0.71527038E-08-0.48293444E-12    2
-0.54368180E+05 0.62765465E+02 0.63761193E+00 0.12159612E+00-0.83763305E-04    3
 0.21059840E-07 0.22115831E-11-0.58600090E+05 0.38041573E+02                   4
c9h17oDqG   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17223836E+01 0.96284375E-01-0.39364371E-04 0.71527038E-08-0.48293444E-12    2
-0.54368180E+05 0.62765465E+02 0.63761193E+00 0.12159612E+00-0.83763305E-04    3
```

```
 0.21059840E-07 0.22115831E-11-0.58600090E+05 0.38041573E+02                   4
c9h17oDqH   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17223836E+01 0.96284375E-01-0.39364371E-04 0.71527038E-08-0.48293444E-12    2
-0.54639922E+05 0.62765465E+02 0.63761193E+00 0.12159612E+00-0.83763305E-04    3
 0.21059840E-07 0.22115831E-11-0.58871832E+05 0.38041573E+02                   4
c9h17oEqA   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26330712E+01 0.88236339E-01-0.35123732E-04 0.62633991E-08-0.41729909E-12    2
-0.53882910E+05 0.39012688E+02 0.10333081E+01 0.11793247E+00-0.78747551E-04    3
 0.19317822E-07 0.19547415E-11-0.56327953E+05 0.37234768E+02                   4
c9h17oEqB   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14182608E+01 0.95756039E-01-0.39085102E-04 0.70931745E-08-0.47845793E-12    2
-0.54758906E+05 0.61071960E+02 0.69998366E+00 0.12119029E+00-0.82862774E-04    3
 0.20241577E-07 0.24716947E-11-0.58878859E+05 0.37773891E+02                   4
c9h17oEqC   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14182608E+01 0.95756039E-01-0.39085102E-04 0.70931745E-08-0.47845793E-12    2
-0.54487168E+05 0.61071960E+02 0.69998366E+00 0.12119029E+00-0.82862774E-04    3
 0.20241577E-07 0.24716947E-11-0.58607117E+05 0.37773891E+02                   4
c9h17oEqD   THERGAS     c   9h  18o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20427570E+01 0.90380341E-01-0.36406032E-04 0.65445089E-08-0.43841737E-12    2
-0.55231008E+05 0.41258247E+02-0.58227444E+00 0.12484038E+00-0.85723135E-04    3
 0.21424613E-07 0.20497033E-11-0.57614609E+05 0.44007767E+02                   4
c8h17hco    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18849661E+02 0.54086044E-01-0.18779167E-04 0.30409297E-08-0.18933939E-12    2
-0.46995488E+05-0.61316322E+02-0.13642266E+00 0.10484816E+00-0.61872401E-04    3
 0.11904929E-07 0.22320409E-11-0.41726328E+05 0.37059387E+02                   4
c8h17co     c   9h  17o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21888067E+02 0.17680371E-01-0.45973793E-05 0.60718119E-09-0.32980075E-13    2
-0.31535605E+05-0.78729637E+02 0.63410324E+00 0.80357298E-01-0.71632960E-04    3
 0.30559153E-07-0.43843913E-11-0.25892623E+05 0.30032263E+02                   4
nonanone    c   9h  18o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18097973E+02 0.55170428E-01-0.19291803E-04 0.31430401E-08-0.19671214E-12    2
-0.50390156E+05-0.57728271E+02-0.41810483E+00 0.10439084E+00-0.60891307E-04    3
 0.11825490E-07 0.19934597E-11-0.45226434E+05 0.38313908E+02                   4
c8h15hco    c   9h  16o   10  0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13349758E+02 0.35031658E-01-0.11402005E-04 0.17652914E-08-0.10663082E-12    2
-0.74649297E+04-0.33384865E+02 0.10643209E+01 0.71520865E-01-0.49151753E-04    3
 0.17507743E-07-0.23133568E-11-0.43351152E+04 0.29169792E+02                   4
c8h15co     c   9h  15o   10  0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16587967E+02 0.48158672E-01-0.16050735E-04 0.25251210E-08-0.15411403E-12    2
-0.14158391E+05-0.46640251E+02 0.70414251E+00 0.94714582E-01-0.61767365E-04    3
 0.18736934E-07-0.13444726E-11-0.10128525E+05 0.34277374E+02                   4
C9h18o4h2   c   9h  20o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24995127E+02 0.60753368E-01-0.20876956E-04 0.33584091E-08-0.20828047E-12    2
-0.65378984E+05-0.86457504E+02 0.54911180E+01 0.91481999E-01 0.17644292E-04    3
-0.86451479E-07 0.39944201E-10-0.59657730E+05 0.18180676E+02                   4
! Mechanism C10
nc10h22    Burcat       c  10h  22o   0     G   200.000  6000.000 1000.      1
 2.94782956E+01 4.90518943E-02-1.70317179E-05 2.72919300E-09-1.63370772E-13    2
-4.43022624E+04-1.24062121E+02 1.54328173E+01-1.32979232E-02 2.82480581E-04    3
-3.65923298E-07 1.45372117E-10-3.58632831E+04-2.79454341E+01-3.00118419E+04    4
Ac10h21     THERGAS     c  10h  21o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29289494E+02 0.44858422E-01-0.13285377E-04 0.19239812E-08-0.11105890E-12    2
-0.19297439E+05-0.11961883E+03-0.23457701E+01 0.12576105E+00-0.90471971E-04    3
 0.36575912E-07-0.68510280E-11-0.96996123E+04 0.46734844E+02                   4
Bc10h21     THERGAS     c  10h  21o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28721216E+02 0.45296576E-01-0.13418864E-04 0.19426223E-08-0.11204689E-12    2
-0.20189984E+05-0.11627267E+03-0.17286946E+01 0.12228124E+00-0.85891297E-04    3
 0.34097770E-07-0.63213857E-11-0.10871845E+05 0.44153362E+02                   4
Cc10h21     THERGAS     c  10h  21o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28943338E+02 0.44864088E-01-0.13227064E-04 0.19083009E-08-0.10981151E-12    2
-0.20230213E+05-0.11740305E+03-0.27808838E+01 0.12973601E+00-0.10264371E-03    3
```

```
 0.49483184E-07-0.11413218E-10-0.10769443E+05 0.48544094E+02                   4
Dc10h21     THERGAS     c  10h  21o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28943338E+02 0.44864088E-01-0.13227064E-04 0.19083009E-08-0.10981151E-12    2
-0.20230213E+05-0.11740305E+03-0.27808838E+01 0.12973601E+00-0.10264371E-03    3
 0.49483184E-07-0.11413218E-10-0.10769443E+05 0.48544094E+02                   4
Ec10h21     THERGAS     c  10h  21o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28943338E+02 0.44864088E-01-0.13227064E-04 0.19083009E-08-0.10981151E-12    2
-0.20230213E+05-0.11740305E+03-0.27808838E+01 0.12973601E+00-0.10264371E-03    3
 0.49483184E-07-0.11413218E-10-0.10769443E+05 0.48544094E+02                   4
c10h20-1    THERGAS     c  10h  20o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26515614E+02 0.47401935E-01-0.15234082E-04 0.23388456E-08-0.14053335E-12    2
-0.27861273E+05-0.10628592E+03-0.13102103E+01 0.11162337E+00-0.62163563E-04    3
 0.11698986E-07 0.10131204E-11-0.19073770E+05 0.41762913E+02                   4
c10h20-2    THERGAS     c  10h  20o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26270830E+02 0.47482774E-01-0.15228185E-04 0.23336344E-08-0.13999980E-12    2
-0.29210492E+05-0.10535822E+03-0.36696702E+00 0.10725550E+00-0.57794907E-04    3
 0.11021086E-07 0.58397276E-12-0.20586807E+05 0.37082981E+02                   4
c10h20-3    THERGAS     c  10h  20o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26262880E+02 0.47570981E-01-0.15266503E-04 0.23390054E-08-0.14021380E-12    2
-0.29251621E+05-0.10548400E+03-0.11908791E+01 0.10897692E+00-0.55881195E-04    3
 0.58401444E-08 0.29915332E-11-0.20464236E+05 0.41111275E+02                   4
c10h20-4    THERGAS     c  10h  20o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26199657E+02 0.47684114E-01-0.15333340E-04 0.23549069E-08-0.14152728E-12    2
-0.29225643E+05-0.10512992E+03-0.16272063E+01 0.11200285E+00-0.63147709E-04    3
 0.13090480E-07 0.42662071E-12-0.20417543E+05 0.42959148E+02                   4
c10h20-5    THERGAS     c  10h  20o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26199657E+02 0.47684114E-01-0.15333340E-04 0.23549069E-08-0.14152728E-12    2
-0.29225643E+05-0.10582301E+03-0.16272063E+01 0.11200285E+00-0.63147709E-04    3
 0.13090480E-07 0.42662071E-12-0.20417543E+05 0.42266064E+02                   4
Cc10h19-1               c  10h  19o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27494865E+02 0.42540282E-01-0.12722077E-04 0.18528156E-08-0.10723009E-12    2
-0.12163602E+05-0.11125929E+03-0.97876167E+00 0.11027271E+00-0.68294255E-04    3
 0.20409267E-07-0.23581406E-11-0.32210605E+04 0.39860458E+02                   4
Dc10h19-2               c  10h  19o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27246592E+02 0.42557411E-01-0.12674682E-04 0.18378599E-08-0.10590410E-12    2
-0.14013533E+05-0.11052481E+03 0.11272774E+00 0.10540497E+00-0.63813015E-04    3
 0.20245102E-07-0.30956839E-11-0.52611914E+04 0.34242584E+02                   4
Ec10h19-3               c  10h  19o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27142550E+02 0.42816136E-01-0.12813034E-04 0.18672164E-08-0.10812222E-12    2
-0.14015018E+05-0.11016758E+03-0.96688104E+00 0.10893556E+00-0.66286950E-04    3
 0.19467313E-07-0.22515624E-11-0.51119956E+04 0.39292183E+02                   4
Fc10h19-4               c  10h  19o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27136860E+02 0.42826567E-01-0.12819281E-04 0.18687154E-08-0.10824710E-12    2
-0.14012416E+05-0.11014788E+03-0.10908816E+01 0.10980077E+00-0.68367524E-04    3
 0.21543581E-07-0.29860483E-11-0.50988540E+04 0.39803535E+02                   4
c10h21qjA  THERGAS      c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31979937E+02 0.48082475E-01-0.14451008E-04 0.21138327E-08-0.12279458E-12    2
-0.37202098E+05-0.12880710E+03-0.67617643E+00 0.12806146E+00-0.78668651E-04    3
 0.18633862E-07 0.23138688E-12-0.27330441E+05 0.43307957E+02                   4
c10h21qjB  THERGAS      c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55662285E+02 0.14006129E-01-0.21194189E-05 0.18302942E-09-0.73446845E-14    2
-0.49763348E+05-0.26397473E+03 0.10483366E+01 0.11973352E+00-0.63358231E-04    3
 0.10361060E-07-0.65690285E-13-0.30132996E+05 0.34798996E+02                   4
c10h21qjC  THERGAS      c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55662285E+02 0.14006129E-01-0.21194189E-05 0.18302942E-09-0.73446845E-14    2
-0.49491734E+05-0.26397644E+03 0.11228895E+01 0.11921944E+00-0.62131257E-04    3
 0.91439301E-08 0.36260800E-12-0.29869270E+05 0.34481541E+02                   4
c10h21qjD  THERGAS      c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55662285E+02 0.14006129E-01-0.21194189E-05 0.18302942E-09-0.73446845E-14    2
-0.49491688E+05-0.26397681E+03 0.10927527E+01 0.11942415E+00-0.62613639E-04    3
 0.96174348E-08 0.19740985E-12-0.29865979E+05 0.34609295E+02                   4
```

```
c10h21qjE  THERGAS      c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55662285E+02 0.14006129E-01-0.21194189E-05 0.18302942E-09-0.73446845E-14    2
-0.49491688E+05-0.26397699E+03 0.10927527E+01 0.11942415E+00-0.62613639E-04    3
 0.96174348E-08 0.19740985E-12-0.29865979E+05 0.34609100E+02                   4
c10h21qA               c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30759600E+02 0.52910622E-01-0.16905233E-04 0.25869924E-08-0.15522466E-12    2
-0.54492996E+05-0.12049338E+03 0.33692801E+00 0.12638777E+00-0.73292700E-04    3
 0.14357664E-07 0.13862720E-11-0.45264039E+05 0.40066643E+02                   4
c10h21qB               c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55909317E+02 0.15878398E-01-0.27236485E-05 0.26331784E-09-0.11622039E-13    2
-0.67567781E+05-0.26364542E+03 0.20793314E+01 0.11791994E+00-0.57612586E-04    3
 0.56883578E-08 0.12370924E-11-0.48068262E+05 0.31481358E+02                   4
c10h21qC               c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55909317E+02 0.15878398E-01-0.27236485E-05 0.26331784E-09-0.11622039E-13    2
-0.67296039E+05-0.26364542E+03 0.20793314E+01 0.11791994E+00-0.57612586E-04    3
 0.56883578E-08 0.12370924E-11-0.47796516E+05 0.31481358E+02                   4
c10h21qD               c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55909317E+02 0.15878398E-01-0.27236485E-05 0.26331784E-09-0.11622039E-13    2
-0.67296039E+05-0.26364542E+03 0.20793314E+01 0.11791994E+00-0.57612586E-04    3
 0.56883578E-08 0.12370924E-11-0.47796516E+05 0.31481358E+02                   4
c10h21qE               c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.55909317E+02 0.15878398E-01-0.27236485E-05 0.26331784E-09-0.11622039E-13    2
-0.67296039E+05-0.26364542E+03 0.20793314E+01 0.11791994E+00-0.57612586E-04    3
 0.56883578E-08 0.12370924E-11-0.47796516E+05 0.31481358E+02                   4
c10h21ojA              c  10h  21o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28651182E+02 0.49429536E-01-0.15154921E-04 0.22542157E-08-0.13276552E-12    2
-0.35959629E+05-0.11404288E+03-0.20700538E+01 0.12389826E+00-0.74274110E-04    3
 0.17223737E-07 0.25091108E-12-0.26585469E+05 0.48176998E+02                   4
c10h21ojB              c  10h  21o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52828289E+02 0.14390012E-01-0.22319848E-05 0.19535100E-09-0.78412339E-14    2
-0.47644188E+05-0.25191972E+03-0.40917990E+00 0.11602409E+00-0.60079601E-04    3
 0.10084306E-07-0.45193214E-12-0.28324639E+05 0.39936134E+02                   4
c10h21ojC              c  10h  21o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52828289E+02 0.14390012E-01-0.22319848E-05 0.19535100E-09-0.78412339E-14    2
-0.47372586E+05-0.25192172E+03-0.33452478E+00 0.11550931E+00-0.58850961E-04    3
 0.88655270E-08-0.23054658E-13-0.28060924E+05 0.39617931E+02                   4
c10h21ojD              c  10h  21o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52828289E+02 0.14390012E-01-0.22319848E-05 0.19535100E-09-0.78412339E-14    2
-0.47372555E+05-0.25192224E+03-0.34959322E+00 0.11561166E+00-0.59092152E-04    3
 0.91022798E-08-0.10565389E-12-0.28059279E+05 0.39681480E+02                   4
c10h21ojE              c  10h  21o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52828289E+02 0.14390012E-01-0.22319848E-05 0.19535100E-09-0.78412339E-14    2
-0.47372555E+05-0.25192245E+03-0.34959322E+00 0.11561166E+00-0.59092152E-04    3
 0.91022798E-08-0.10565389E-12-0.28059279E+05 0.39681259E+02                   4
c10h20rAqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28459442E+02 0.52573264E-01-0.16271346E-04 0.24291729E-08-0.14303012E-12    2
-0.31477102E+05-0.10461922E+03 0.59737861E+00 0.12767155E+00-0.83085994E-04    3
 0.20811832E-07 0.10803475E-11-0.23732975E+05 0.39720745E+02                   4
c10h20rBqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28475998E+02 0.52570734E-01-0.16276803E-04 0.24312972E-08-0.14324433E-12    2
-0.29616828E+05-0.10470323E+03 0.41093189E+00 0.12898803E+00-0.86015396E-04    3
 0.23540006E-07 0.16516874E-12-0.21853074E+05 0.40502056E+02                   4
c10h20rCqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28475998E+02 0.52570734E-01-0.16276803E-04 0.24312972E-08-0.14324433E-12    2
-0.29616828E+05-0.10470323E+03 0.41093189E+00 0.12898803E+00-0.86015396E-04    3
 0.23540006E-07 0.16516874E-12-0.21853074E+05 0.40502056E+02                   4
c10h20rDqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28475998E+02 0.52570734E-01-0.16276803E-04 0.24312972E-08-0.14324433E-12    2
-0.29616828E+05-0.10470323E+03 0.41093189E+00 0.12898803E+00-0.86015396E-04    3
 0.23540006E-07 0.16516874E-12-0.21853074E+05 0.40502056E+02                   4
c10h20rEqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.28475998E+02 0.52570734E-01-0.16276803E-04 0.24312972E-08-0.14324433E-12    2
-0.29616828E+05-0.10470323E+03 0.41093189E+00 0.12898803E+00-0.86015396E-04    3
 0.23540000E-07 0.16516874E-12-0.21853074E+05 0.40502056E+02                   4
c10h20rFqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28396265E+02 0.52712884E-01-0.16360435E-04 0.24511029E-08-0.14487271E-12    2
-0.29584795E+05-0.10425859E+03 0.32975930E+00 0.12953936E+00-0.87311826E-04    3
 0.24808161E-07-0.27540847E-12-0.21844221E+05 0.40847473E+02                   4
c10h20rGqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28396265E+02 0.52712884E-01-0.16360435E-04 0.24511029E-08-0.14487271E-12    2
-0.29584795E+05-0.10425859E+03 0.32975930E+00 0.12953936E+00-0.87311826E-04    3
 0.24808161E-07-0.27540847E-12-0.21844221E+05 0.40847473E+02                   4
c10h20rHqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28396265E+02 0.52712884E-01-0.16360435E-04 0.24511029E-08-0.14487271E-12    2
-0.29584795E+05-0.10425859E+03 0.32975930E+00 0.12953936E+00-0.87311826E-04    3
 0.24808161E-07-0.27540847E-12-0.21844221E+05 0.40847473E+02                   4
c10h20rIqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28212860E+02 0.53080518E-01-0.16516071E-04 0.24766538E-08-0.14635405E-12    2
-0.29560547E+05-0.10334534E+03 0.12003565E+01 0.12336151E+00-0.73666262E-04    3
 0.12558383E-07 0.36963588E-11-0.21927449E+05 0.37223286E+02                   4
c10h20rJqA             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28813601E+02 0.52583888E-01-0.16347774E-04 0.24497906E-08-0.14469438E-12    2
-0.28681256E+05-0.10687256E+03 0.68095303E+00 0.12615962E+00-0.76598983E-04    3
 0.13381992E-07 0.37552444E-11-0.20765777E+05 0.39391712E+02                   4
c10h20rAqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28925842E+02 0.52648898E-01-0.16397245E-04 0.24593363E-08-0.14528865E-12    2
-0.31435486E+05-0.10780446E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.24155092E+05 0.20979315E+02                   4
c10h20rBqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27894627E+02 0.53328440E-01-0.16618515E-04 0.24982107E-08-0.14806701E-12    2
-0.34618844E+05-0.10212566E+03 0.53019609E+01 0.97772479E-01-0.13940835E-04    3
-0.45867335E-07 0.23818609E-10-0.27842705E+05 0.18286259E+02                   4
c10h20rCqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31983961E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24919096E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rDqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31983961E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24919096E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rEqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31983961E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24919096E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rFqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31960016E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24908158E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rGqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31960016E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24908158E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rHqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31960016E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24908158E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rIqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28266088E+02 0.53252280E-01-0.16629039E-04 0.25013531E-08-0.14820172E-12    2
-0.31939924E+05-0.10395113E+03 0.56969180E+01 0.94039954E-01-0.25520264E-05    3
-0.57827471E-07 0.28004765E-10-0.25005314E+05 0.17196367E+02                   4
c10h20rJqB             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28939465E+02 0.52625559E-01-0.16383952E-04 0.24562672E-08-0.14504126E-12    2
```

```
-0.31088889E+05-0.10788091E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.23802830E+05 0.20979315E+02                   4
c10h20rAqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28939465E+02 0.52625559E-01-0.16383952E-04 0.24562672E-08-0.14504126E-12    2
-0.30817148E+05-0.10788091E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.23531090E+05 0.20979315E+02                   4
c10h20rBqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28266088E+02 0.53252280E-01-0.16629039E-04 0.25013531E-08-0.14820172E-12    2
-0.31668184E+05-0.10395113E+03 0.56969180E+01 0.94039954E-01-0.25520264E-05    3
-0.57827471E-07 0.28004765E-10-0.24733574E+05 0.17196367E+02                   4
c10h20rCqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28143341E+02 0.52844342E-01-0.16394230E-04 0.24563451E-08-0.14523890E-12    2
-0.34397582E+05-0.10340305E+03 0.44792609E+01 0.10363200E+00-0.26854481E-04    3
-0.34318525E-07 0.20085766E-10-0.27493064E+05 0.21705643E+02                   4
c10h20rDqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31712221E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24647355E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rEqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31712221E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24647355E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rFqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rGqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rHqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rIqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28266088E+02 0.53252280E-01-0.16629039E-04 0.25013531E-08-0.14820172E-12    2
-0.31668184E+05-0.10395113E+03 0.56969180E+01 0.94039954E-01-0.25520264E-05    3
-0.57827471E-07 0.28004765E-10-0.24733574E+05 0.17196367E+02                   4
c10h20rJqC             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28939465E+02 0.52625559E-01-0.16383952E-04 0.24562672E-08-0.14504126E-12    2
-0.30817148E+05-0.10788091E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.23531090E+05 0.20979315E+02                   4
c10h20rAqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28939465E+02 0.52625559E-01-0.16383952E-04 0.24562672E-08-0.14504126E-12    2
-0.30817148E+05-0.10788091E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.23531090E+05 0.20979315E+02                   4
c10h20rBqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28266088E+02 0.53252280E-01-0.16629039E-04 0.25013531E-08-0.14820172E-12    2
-0.31668184E+05-0.10395113E+03 0.56969180E+01 0.94039954E-01-0.25520264E-05    3
-0.57827471E-07 0.28004765E-10-0.24733574E+05 0.17196367E+02                   4
c10h20rCqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rDqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28143341E+02 0.52844342E-01-0.16394230E-04 0.24563451E-08-0.14523890E-12    2
-0.34397582E+05-0.10340305E+03 0.44792609E+01 0.10363200E+00-0.26854481E-04    3
-0.34318525E-07 0.20085766E-10-0.27493064E+05 0.21705643E+02                   4
c10h20rEqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28498562E+02 0.52798327E-01-0.16423372E-04 0.24641498E-08-0.14577700E-12    2
-0.31712221E+05-0.10513826E+03 0.47969203E+01 0.10043297E+00-0.16742717E-04    3
-0.45006665E-07 0.23822253E-10-0.24647355E+05 0.20943521E+02                   4
c10h20rFqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rGqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rHqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28441055E+02 0.52897103E-01-0.16479386E-04 0.24769908E-08-0.14680398E-12    2
-0.31688275E+05-0.10481537E+03 0.46923981E+01 0.10117456E+00-0.18562074E-04    3
-0.43157694E-07 0.23158048E-10-0.24636418E+05 0.21383787E+02                   4
c10h20rIqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28266088E+02 0.53252280E-01-0.16629039E-04 0.25013531E-08-0.14820172E-12    2
-0.31668184E+05-0.10395113E+03 0.56969180E+01 0.94039954E-01-0.25520264E-05    3
-0.57827471E-07 0.28004765E-10-0.24733574E+05 0.17196367E+02                   4
c10h20rJqD             c  10h  21o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28939465E+02 0.52625559E-01-0.16383952E-04 0.24562672E-08-0.14504126E-12    2
-0.30817148E+05-0.10788091E+03 0.47963285E+01 0.99480771E-01-0.11831018E-04    3
-0.50670540E-07 0.25822594E-10-0.23531090E+05 0.20979315E+02                   4
```

```
c10h20qjAqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32985863E+02 0.52628201E-01-0.16060883E-04 0.23757818E-08-0.13911063E-12    2
-0.51208629E+05-0.12698827E+03 0.35473721E+01 0.11093427E+00-0.12473768E-04    3
-0.61542849E-07 0.31420380E-10-0.42451121E+05 0.29682318E+02                   4
c10h20qjBqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12595253E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156719E+05 0.17061419E+02                   4
c10h20qjCqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12595273E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156715E+05 0.17061211E+02                   4
c10h20qjDqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12595282E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156715E+05 0.17061127E+02                   4
c10h20qjEqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12525974E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156715E+05 0.17754217E+02                   4
c10h20qjFqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12525961E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156719E+05 0.17754332E+02                   4
c10h20qjGqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12525934E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156719E+05 0.17754601E+02                   4
c10h20qjHqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324992E+05-0.12525893E+03 0.64481611E+01 0.10191055E+00-0.35049706E-06    3
-0.68282013E-07 0.32786367E-10-0.41160012E+05 0.17626896E+02                   4
c10h20qjIqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49596598E+05-0.12525720E+03 0.63736076E+01 0.10242463E+00-0.15774677E-05    3
-0.67064882E-07 0.32358068E-10-0.41423734E+05 0.17944387E+02                   4
c10h20qjJqA             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32915627E+02 0.53615347E-01-0.16582930E-04 0.24762110E-08-0.14591048E-12    2
-0.47172191E+05-0.12472626E+03 0.21964145E+01 0.12951265E+00-0.67287408E-04    3
-0.21048794E-08 0.99785171E-11-0.38379750E+05 0.35925396E+02                   4
c10h20qjAqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32973026E+02 0.53784959E-01-0.16697939E-04 0.25020401E-08-0.14789249E-12    2
-0.49281844E+05-0.12535506E+03 0.62927918E+01 0.10299189E+00-0.29567620E-05    3
-0.65673191E-07 0.31861014E-10-0.41143437E+05 0.17590801E+02                   4
c10h20qjBqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30388306E+02 0.58260169E-01-0.18733263E-04 0.28798666E-08-0.17334711E-12    2
-0.52452211E+05-0.11499854E+03 0.37225022E+01 0.10889319E+00-0.44233770E-05    3
-0.70692039E-07 0.35231474E-10-0.44560867E+05 0.27087095E+02                   4
c10h20qjCqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525206E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44972561E+02                   4
c10h20qjDqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525214E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44972477E+02                   4
c10h20qjEqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525214E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44972485E+02                   4
c10h20qjFqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525201E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44972607E+02                   4
c10h20qjGqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525174E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44972866E+02                   4
c10h20qjHqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524566E+05-0.13525119E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.43008395E+05 0.44973419E+02                   4
c10h20qjIqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52796277E+05-0.13524973E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43278156E+05 0.45048923E+02                   4
c10h20qjJqB             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49596859E+05-0.12526080E+03 0.65229182E+01 0.10139508E+00 0.87981141E-06    3
-0.69502441E-07 0.33215826E-10-0.41439785E+05 0.17308374E+02                   4
c10h20qjAqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49324937E+05-0.12595265E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156715E+05 0.17061287E+02                   4
c10h20qjBqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13524974E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45048908E+02                   4
c10h20qjCqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30500807E+02 0.58060363E-01-0.18616103E-04 0.28521925E-08-0.17107585E-12    2
-0.52497586E+05-0.11562662E+03 0.38273966E+01 0.10817302E+00-0.27106962E-05    3
-0.72385973E-07 0.35826130E-10-0.44572203E+05 0.26641506E+02                   4
c10h20qjDqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525214E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44972477E+02                   4
c10h20qjEqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525214E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44972485E+02                   4
c10h20qjFqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455893E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665680E+02                   4
c10h20qjGqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455867E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665561E+02                   4
c10h20qjHqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455811E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45666504E+02                   4
c10h20qjIqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13455666E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45741989E+02                   4
c10h20qjJqC             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49325117E+05-0.12595386E+03 0.65229182E+01 0.10139508E+00 0.87981141E-06    3
-0.69502441E-07 0.33215826E-10-0.41168047E+05 0.16615330E+02                   4
c10h20qjAqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
```

```
-0.49324930E+05-0.12595288E+03 0.64180241E+01 0.10211526E+00-0.83287296E-06    3
-0.67808507E-07 0.32621170E-10-0.41156711E+05 0.17061066E+02                   4
c10h20qjBqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13524974E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45048908E+02                   4
c10h20qjCqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525119E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44973419E+02                   4
c10h20qjDqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30500807E+02 0.58060363E-01-0.18616103E-04 0.28521925E-08-0.17107585E-12    2
-0.52497535E+05-0.11562663E+03 0.37972596E+01 0.10837772E+00-0.31930722E-05    3
-0.71912467E-07 0.35660933E-10-0.44568910E+05 0.26769621E+02                   4
c10h20qjEqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525214E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44972485E+02                   4
c10h20qjFqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455893E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665680E+02                   4
c10h20qjGqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455865E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665958E+02                   4
c10h20qjHqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455811E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45666504E+02                   4
c10h20qjIqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13455666E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45741989E+02                   4
c10h20qjJqD             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49325117E+05-0.12595378E+03 0.65229182E+01 0.10139508E+00 0.87981141E-06    3
-0.69502441E-07 0.33215826E-10-0.41168047E+05 0.16615398E+02                   4
c10h20qjAqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49325117E+05-0.12595355E+03 0.65229182E+01 0.10139508E+00 0.87981141E-06    3
-0.69502441E-07 0.33215826E-10-0.41168047E+05 0.16615629E+02                   4
c10h20qjBqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13524974E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45048908E+02                   4
c10h20qjCqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525119E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44973419E+02                   4
c10h20qjDqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13525174E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.44972866E+02                   4
c10h20qjEqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30500807E+02 0.58060363E-01-0.18616103E-04 0.28521925E-08-0.17107585E-12    2
-0.52497535E+05-0.11562671E+03 0.37972596E+01 0.10837772E+00-0.31930722E-05    3
-0.71912467E-07 0.35660933E-10-0.44568910E+05 0.26769545E+02                   4
c10h20qjFqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455891E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
```

```
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665699E+02                   4
c10h20qjGqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455867E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45665951E+02                   4
c10h20qjHqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52252824E+05-0.13455811E+03-0.35101023E+ 0.1490370200E+00-0.10659422E-03    3
 0.30515071E-07 0.18942989E-12-0.42736656E+05 0.45666504E+02                   4
c10h20qjIqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.34605728E+02 0.51931810E-01-0.15951700E-04 0.23693092E-08-0.13905114E-12    2
-0.52524539E+05-0.13455666E+03-0.36819410E+ 0.1491463300E+00-0.10683233E-03    3
 0.30729982E-07 0.12051423E-12-0.43006418E+05 0.45741989E+02                   4
c10h20qjJqE             c  10h  21o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33080109E+02 0.53594299E-01-0.16585949E-04 0.24755595E-08-0.14571772E-12    2
-0.49325117E+05-0.12595369E+03 0.65229182E+01 0.10139508E+00 0.87981141E-06    3
-0.69502441E-07 0.33215826E-10-0.41168047E+05 0.16615499E+02                   4
c10h19oAqC              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11590153E+02 0.83182037E-01-0.31728312E-04 0.54904468E-08-0.35812512E-12    2
-0.58589375E+05-0.87954865E+01 0.11211485E+01 0.12964261E+00-0.83896506E-04    3
 0.18760506E-07 0.24684259E-11-0.57844082E+05 0.38015377E+02                   4
c10h19oAqB              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.61428921E+02 0.73985080E-02-0.64650879E-06 0.13065672E-10 0.15063332E-14    2
-0.78763922E+05-0.29117169E+03 0.34765215E+01 0.11242943E+00-0.50264323E-04    3
 0.34509009E-12 0.25391304E-11-0.57292062E+05 0.28297129E+02                   4
c10h19oAqD              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11444750E+02 0.83441965E-01-0.31878910E-04 0.55256888E-08-0.36100173E-12    2
-0.58531816E+05-0.79862823E+01 0.10217669E+01 0.13032886E+00-0.85535583E-04    3
 0.20385862E-07 0.18971864E-11-0.57833406E+05 0.38436638E+02                   4
c10h19oAqE              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11444750E+02 0.83441965E-01-0.31878910E-04 0.55256888E-08-0.36100173E-12    2
-0.58531816E+05-0.79862823E+01 0.10217669E+01 0.13032886E+00-0.85535583E-04    3
 0.20385862E-07 0.18971864E-11-0.57833406E+05 0.38436638E+02                   4
c10h19oBqA              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11548145E+02 0.82428657E-01-0.31227239E-04 0.53784204E-08-0.34969507E-12    2
-0.59496086E+05-0.85751190E+01 0.19191738E+01 0.12508427E+00-0.79538993E-04    3
 0.18348407E-07 0.18895786E-11-0.58781348E+05 0.34556576E+02                   4
c10h19oBqC              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56025974E+02 0.14278658E-01-0.23769949E-05 0.22432770E-09-0.97358543E-14    2
-0.80033750E+05-0.26068262E+03 0.24955807E+01 0.11607614E+00-0.56793178E-04    3
 0.45560511E-08 0.18021726E-11-0.60708680E+05 0.32605965E+02                   4
c10h19oBqD              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13109038E+02 0.80455363E-01-0.30342106E-04 0.52078173E-08-0.33769472E-12    2
-0.62891242E+05-0.17908829E+02 0.78096157E+00 0.12965928E+00-0.84255262E-04    3
 0.20250839E-07 0.15820366E-11-0.61338777E+05 0.39508900E+02                   4
c10h19oBqE              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12932843E+02 0.80762722E-01-0.30512985E-04 0.52463913E-08-0.34075439E-12    2
-0.62821281E+05-0.16926941E+02 0.10310204E+01 0.12791343E+00-0.80031365E-04    3
 0.16004151E-07 0.30955052E-11-0.61365379E+05 0.38451447E+02                   4
c10h19oBqF              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12932843E+02 0.80762722E-01-0.30512985E-04 0.52463913E-08-0.34075439E-12    2
-0.62821281E+05-0.16926941E+02 0.10310204E+01 0.12791343E+00-0.80031365E-04    3
 0.16004151E-07 0.30955052E-11-0.61365379E+05 0.38451447E+02                   4
c10h19oCqA              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42946296E+01 0.94707742E-01-0.37387028E-04 0.66281256E-08-0.43978027E-12    2
-0.57242266E+05 0.32156876E+02 0.53745258E+00 0.13173097E+00-0.90370573E-04    3
 0.25262342E-07 0.54501569E-12-0.59191039E+05 0.41121479E+02                   4
c10h19oCqB              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.37387495E+01 0.96779443E-01-0.38619233E-04 0.68964798E-08-0.45982337E-12    2
-0.58602602E+05 0.34215248E+02-0.95710278E+00 0.13778599E+00-0.95266427E-04    3
 0.25265606E-07 0.13928929E-11-0.60490449E+05 0.47383873E+02                   4
```

```
c10h19oCqD              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38045306E+01 0.96669458E-01-0.38568694E-04 0.68873902E-08-0.45925487E-12    2
-0.58628023E+05 0.33848389E+02-0.93580538E+00 0.13766269E+00-0.95032832E-04    3
 0.25094911E-07 0.14319886E-11-0.60493059E+05 0.47290333E+02                   4
c10h19oCqE              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oCqF              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oCqG              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oDqA              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42946296E+01 0.94707742E-01-0.37387028E-04 0.66281256E-08-0.43978027E-12    2
-0.57242273E+05 0.32156876E+02 0.53745258E+00 0.13173097E+00-0.90370573E-04    3
 0.25262342E-07 0.54501569E-12-0.59191043E+05 0.41121479E+02                   4
c10h19oDqB              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.58075793E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61762266E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oDqC              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39044983E+01 0.96493870E-01-0.38473790E-04 0.68666330E-08-0.45765345E-12    2
-0.58666844E+05 0.33292763E+02-0.97796863E+00 0.13794920E+00-0.95709751E-04    3
 0.25763836E-07 0.11961563E-11-0.60488449E+05 0.47469788E+02                   4
c10h19oDqE              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36909566E+01 0.96866585E-01-0.38674560E-04 0.69104171E-08-0.46102179E-12    2
-0.58582883E+05 0.34482254E+02-0.11053472E+01 0.13883355E+00-0.97829798E-04    3
 0.27868289E-07 0.45764933E-12-0.60474852E+05 0.48008976E+02                   4
c10h19oDqF              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oDqG              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oDqH              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oEqA              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42946296E+01 0.94707742E-01-0.37387028E-04 0.66281256E-08-0.43978027E-12    2
-0.57242273E+05 0.32156876E+02 0.53745258E+00 0.13173097E+00-0.90370573E-04    3
 0.25262342E-07 0.54501569E-12-0.59191043E+05 0.41121479E+02                   4
c10h19oEqB              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29445809E+00 0.10210376E+00-0.41245999E-04 0.74289428E-08-0.49832203E-12    2
-0.58135543E+05 0.53942924E+02 0.47182038E+00 0.13311063E+00-0.89919937E-04    3
 0.21575469E-07 0.27115042E-11-0.61770289E+05 0.40529884E+02                   4
c10h19oEqC              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29445809E+00 0.10210376E+00-0.41245999E-04 0.74289428E-08-0.49832203E-12    2
-0.57863805E+05 0.53942924E+02 0.47182038E+00 0.13311063E+00-0.89919937E-04    3
 0.21575469E-07 0.27115042E-11-0.61498547E+05 0.40529884E+02                   4
c10h19oEqD              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39044983E+01 0.96493870E-01-0.38473790E-04 0.68666330E-08-0.45765345E-12    2
-0.58666844E+05 0.33292763E+02-0.97796863E+00 0.13794920E+00-0.95709751E-04    3
 0.25763836E-07 0.11961563E-11-0.60488449E+05 0.47469788E+02                   4
c10h19oEqF              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36909566E+01 0.96866585E-01-0.38674560E-04 0.69104171E-08-0.46102179E-12    2
-0.58582883E+05 0.34482254E+02-0.11053472E+01 0.13883355E+00-0.97829798E-04    3
 0.27868289E-07 0.45764933E-12-0.60474852E+05 0.48008976E+02                   4
c10h19oEqG              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oEqH              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.57804047E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61490523E+05 0.40849651E+02                   4
c10h19oEqI              c  10h  20o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14462896E+00 0.10236952E+00-0.41398976E-04 0.74644753E-08-0.50120054E-12    2
-0.58075789E+05 0.54777817E+02 0.39614204E+00 0.13364057E+00-0.91203772E-04    3
 0.22865132E-07 0.22531128E-11-0.61762262E+05 0.40849651E+02                   4
c10h20o-AB              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58130234E+02 0.62915743E-02-0.55257777E-06 0.21835669E-10 0.70520582E-16    2
-0.55167484E+05-0.28563101E+03 0.63083464E+00 0.10598479E+00-0.42805263E-04    3
-0.19886175E-08 0.20604224E-11-0.33339930E+05 0.33148964E+02                   4
c10h20o-BC              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.27038485E+02 0.52126370E-01-0.17470846E-04 0.27637379E-08-0.16955026E-12    2
-0.44326773E+05-0.10994640E+03-0.21507387E+01 0.12326450E+00-0.71355083E-04    3
 0.12118758E-07 0.23816222E-11-0.35594195E+05 0.43733467E+02                   4
c10h20o-CD              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.27038485E+02 0.52126370E-01-0.17470846E-04 0.27637379E-08-0.16955026E-12    2
-0.44055027E+05-0.10994640E+03-0.21507387E+01 0.12326450E+00-0.71355083E-04    3
 0.12118758E-07 0.23816222E-11-0.35322449E+05 0.43733467E+02                   4
c10h20o-DE              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.27038485E+02 0.52126370E-01-0.17470846E-04 0.27637379E-08-0.16955026E-12    2
-0.44055027E+05-0.10994640E+03-0.21507387E+01 0.12326450E+00-0.71355083E-04    3
 0.12118758E-07 0.23816222E-11-0.35322449E+05 0.43733467E+02                   4
c10h20o-EF              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.27038485E+02 0.52126370E-01-0.17470846E-04 0.27637379E-08-0.16955026E-12    2
-0.44055027E+05-0.11133257E+03-0.21507387E+01 0.12326450E+00-0.71355083E-04    3
 0.12118758E-07 0.23816222E-11-0.35322449E+05 0.42347309E+02                   4
c10h20o-AC              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.61491035E+02 0.36242090E-02-0.24470569E-06 0.15037149E-10-0.72402211E-15    2
-0.58275875E+05-0.30832449E+03 0.45498490E+00 0.98218016E-01-0.25881527E-04    3
-0.10486705E-07 0.25729473E-11-0.33880418E+05 0.34379387E+02                   4
c10h20o-BD              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52293938E+02 0.19480184E+00-0.94029499E-04 0.19223844E-07-0.14135998E-11    2
-0.15714042E+05 0.32645331E+03-0.72015400E+01 0.14354704E+00-0.10381097E-03    3
 0.31099074E-07 0.18769478E-11-0.35545469E+05 0.66330521E+02                   4
c10h20o-CE              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52293938E+02 0.19480184E+00-0.94029499E-04 0.19223844E-07-0.14135998E-11    2
-0.15442298E+05 0.32645331E+03-0.72015400E+01 0.14354704E+00-0.10381097E-03    3
 0.31099074E-07 0.18769478E-11-0.35273727E+05 0.66330521E+02                   4
c10h20o-DF              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.52293938E+02 0.19480184E+00-0.94029499E-04 0.19223844E-07-0.14135998E-11    2
-0.15442298E+05 0.32645331E+03-0.72015400E+01 0.14354704E+00-0.10381097E-03    3
 0.31099074E-07 0.18769478E-11-0.35273727E+05 0.66330521E+02                   4
c10h20o-AD              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.61710880E+02 0.34029186E-02-0.18604972E-06 0.42117195E-11 0.11098688E-15    2
-0.67029992E+05-0.30925610E+03 0.63435179E+00 0.11151700E+00-0.49808223E-04    3
 0.12573698E-08 0.13267947E-11-0.44048410E+05 0.28593245E+02                   4
c10h20o-BE              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.97585316E+01 0.11714813E+00-0.50663559E-04 0.95754977E-08-0.66482226E-12    2
-0.40217547E+05 0.92040802E+02-0.45932884E+01 0.14279509E+00-0.10274935E-03    3
 0.28562233E-07 0.14102400E-11-0.46006035E+05 0.49908825E+02                   4
c10h20o-CF              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.97585316E+01 0.11714813E+00-0.50663559E-04 0.95754977E-08-0.66482226E-12    2
-0.39945801E+05 0.92040802E+02-0.45932884E+01 0.14279509E+00-0.10274935E-03    3
 0.28562233E-07 0.14102400E-11-0.45734293E+05 0.49908833E+02                   4
c10h20o-DG              c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.97585316E+01 0.11714813E+00-0.50663559E-04 0.95754977E-08-0.66482226E-12    2
-0.39945801E+05 0.90654648E+02-0.45932884E+01 0.14279509E+00-0.10274935E-03    3
 0.28562233E-07 0.14102400E-11-0.45734293E+05 0.48522671E+02                   4
c10h20o-AE     11/21/07 c  10h  20o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61799072E+02 0.32458992E-02-0.93891153E-07-0.17508134E-10 0.18891264E-14    2
-0.69783078E+05-0.31246600E+03 0.86580700E+00 0.10991108E+00-0.45952915E-04    3
-0.25846512E-08 0.26833015E-11-0.46790559E+05 0.24895792E+02                   4
c10h20o-BF     11/21/07 c  10h  20o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.97585316E+01 0.11714813E+00-0.50663559E-04 0.95754977E-08-0.66482226E-12    2
-0.42934949E+05 0.89323395E+02-0.45932884E+01 0.14279509E+00-0.10274935E-03    3
 0.28562233E-07 0.14102400E-11-0.48723438E+05 0.47191425E+02                   4
c10h20o-CG     11/21/07 c  10h  20o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.97585316E+01 0.11714813E+00-0.50663559E-04 0.95754977E-08-0.66482226E-12    2
-0.42663203E+05 0.89323395E+02-0.45932884E+01 0.14279509E+00-0.10274935E-03    3
 0.28562233E-07 0.14102400E-11-0.48451695E+05 0.47191425E+02                   4
Ac10h19oB     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16306988E+02 0.64763352E-01-0.22720040E-04 0.37104051E-08-0.23262325E-12    2
-0.28768211E+05-0.44487953E+02-0.12540367E+01 0.12126518E+00-0.82816085E-04    3
 0.26716666E-07-0.21227701E-11-0.24799623E+05 0.43169273E+02                   4
Bc10h19oA     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14784694E+02 0.66859469E-01-0.23652156E-04 0.38844550E-08-0.24443471E-12    2
-0.26356234E+05-0.35625694E+02-0.10601692E+01 0.12435768E+00-0.93507741E-04    3
 0.37443890E-07-0.56362046E-11-0.23286785E+05 0.41417789E+02                   4
Bc10h19oC     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.34623337E+01 0.85501805E-01-0.32684758E-04 0.56652403E-08-0.36998310E-12    2
-0.26665381E+05 0.27313919E+02-0.10258578E+01 0.12298658E+00-0.89079076E-04    3
 0.31129815E-07-0.24958161E-11-0.28062449E+05 0.41072895E+02                   4
Cc10h19oB     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16080677E+02 0.64582072E-01-0.22554279E-04 0.36708492E-08-0.22955994E-12    2
-0.31633113E+05-0.43767708E+02-0.14350673E+01 0.12476747E+00-0.94966519E-04    3
 0.40111697E-07-0.69548273E-11-0.27837811E+05 0.42781857E+02                   4
Cc10h19oD     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.40769310E+01 0.84358312E-01-0.32092117E-04 0.55426557E-08-0.36101796E-12    2
-0.26854406E+05 0.23821968E+02-0.16586093E+01 0.12762536E+00-0.99214172E-04    3
 0.40035612E-07-0.53355241E-11-0.28006711E+05 0.43481628E+02                   4
Dc10h19oC     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.36821523E+01 0.85037172E-01-0.32452779E-04 0.56205645E-08-0.36697403E-12    2
-0.26696336E+05 0.25984703E+02-0.18879009E+01 0.12921445E+00-0.10298457E-03    3
 0.43733660E-07-0.66181496E-11-0.27982365E+05 0.44408314E+02                   4
Dc10h19oE     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.40691190E+01 0.84372088E-01-0.32099975E-04 0.55444547E-08-0.36116149E-12    2
-0.26850461E+05 0.23846092E+02-0.18306836E+01 0.12884861E+00-0.10219141E-03    3
 0.43032703E-07-0.64025768E-11-0.27988893E+05 0.44183956E+02                   4
Ec10h19oD              c  10h  19o   10    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40350060E+01 0.84432267E-01-0.32134987E-04 0.55526681E-08-0.36183163E-12    2
-0.26836793E+05 0.24024002E+02-0.16566451E+01 0.12764387E+00-0.99291581E-04    3
 0.40130022E-07-0.53725045E-11-0.28007609E+05 0.43434109E+02                   4
Fc10h19oE              c  10h  19o   10    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40350060E+01 0.84432267E-01-0.32134987E-04 0.55526681E-08-0.36183163E-12    2
-0.26836895E+05 0.24035446E+02-0.15852615E+01 0.12715800E+00-0.98145771E-04    3
 0.39005553E-07-0.49804830E-11-0.28015389E+05 0.43142235E+02                   4
Ac10h19oC     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.43805685E+01 0.83317816E-01-0.31508171E-04 0.54213318E-08-0.35230158E-12    2
-0.22559186E+05 0.24663010E+02-0.19080181E+01 0.12950268E+00-0.10383031E-03    3
 0.43907157E-07-0.64749673E-11-0.23652576E+05 0.46781288E+02                   4
Cc10h19oA     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15200550E+02 0.65086745E-01-0.22660994E-04 0.36796133E-08-0.22970135E-12    2
-0.24236953E+05-0.35351997E+02-0.14894106E+01 0.12863515E+00-0.10679692E-03    3
 0.50954007E-07-0.10250223E-10-0.21090385E+05 0.45204720E+02                   4
Bc10h19oD     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.41005588E+01 0.83268210E-01-0.31393880E-04 0.53888471E-08-0.34954036E-12    2
-0.23567004E+05 0.26396599E+02-0.98894167E+00 0.12397141E+00-0.94435469E-04    3
 0.36740563E-07-0.43268960E-11-0.24857701E+05 0.42914986E+02                   4
Dc10h19oB     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16329407E+02 0.63091114E-01-0.21706626E-04 0.34954499E-08-0.21696413E-12    2
-0.28393789E+05-0.42317795E+02-0.17287970E+01 0.12794283E+00-0.10541788E-03    3
 0.50665591E-07-0.10489309E-10-0.24595764E+05 0.46272469E+02                   4
Cc10h19oE     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
Ec10h19oC     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.42453704E+01 0.82912691E-01-0.31188483E-04 0.53431251E-08-0.34600122E-12    2
-0.23570279E+05 0.25720589E+02-0.22029736E+01 0.13251169E+00-0.11369693E-03    3
 0.54527877E-07-0.10232525E-10-0.24737500E+05 0.47996113E+02                   4
Dc10h19oF     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
Fc10h19oD     11/29/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
Ac10h19oD     11/30/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.47539911E+01 0.82678452E-01-0.31171461E-04 0.53491589E-08-0.34681809E-12    2
-0.22707973E+05 0.22577545E+02-0.19475780E+01 0.12979481E+00-0.10458541E-03    3
 0.44722682E-07-0.67872613E-11-0.23648559E+05 0.46946564E+02                   4
Dc10h19oA     11/30/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15200550E+02 0.65086745E-01-0.22660994E-04 0.36796133E-08-0.22970135E-12    2
-0.24236953E+05-0.35351997E+02-0.14894106E+01 0.12863515E+00-0.10679692E-03    3
 0.50954007E-07-0.10250223E-10-0.21090385E+05 0.45204720E+02                   4
Bc10h19oE     11/30/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.41005588E+01 0.83268210E-01-0.31393880E-04 0.53888471E-08-0.34954036E-12    2
-0.23567004E+05 0.26396599E+02-0.98894167E+00 0.12397141E+00-0.94435469E-04    3
 0.36740563E-07-0.43268960E-11-0.24857701E+05 0.42914986E+02                   4
Ec10h19oB     11/30/2007 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16329407E+02 0.63091114E-01-0.21706626E-04 0.34954499E-08-0.21696413E-12    2
-0.28393789E+05-0.42317795E+02-0.17287970E+01 0.12794283E+00-0.10541788E-03    3
 0.50665591E-07-0.10489309E-10-0.24595764E+05 0.46272469E+02                   4
Cc10h19oF     11/16/07 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
Fc10h19oC     11/16/07 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.42453704E+01 0.82912691E-01-0.31188483E-04 0.53431251E-08-0.34600122E-12    2
-0.23570279E+05 0.25720589E+02-0.22029736E+01 0.13251169E+00-0.11369693E-03    3
 0.54527877E-07-0.10232525E-10-0.24737500E+05 0.47996113E+02                   4
Gc10h19oD     11/15/07 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
Ac10h19oE     11/21/07 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.47539911E+01 0.82678452E-01-0.31171461E-04 0.53491589E-08-0.34681809E-12    2
-0.22707973E+05 0.22577545E+02-0.19475780E+01 0.12979481E+00-0.10458541E-03    3
 0.44722682E-07-0.67872613E-11-0.23648559E+05 0.46946564E+02                   4
Ec10h19oA     11/21/07 c  10h  19o   1     0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15200550E+02 0.65086745E-01-0.22660994E-04 0.36796133E-08-0.22970135E-12    2
-0.24236953E+05-0.35351997E+02-0.14894106E+01 0.12863515E+00-0.10679692E-03    3
 0.50954007E-07-0.10250223E-10-0.21090385E+05 0.45204720E+02                   4
```

```
c3h7coc6h12-4  11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
dec4*o7oo            c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
dec4*o5j7ooh         c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38343363E+05 0.37901070E+02-0.45693436E+00 0.14243297E+00-0.11859096E-03    3
 0.49625644E-07-0.66309679E-11-0.41202746E+05 0.42964340E+02                   4
dec4*o5oo7ooh        c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49842552E+02                   4
dec4*o7*o5ooh        c  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14980563E+02 0.12761715E+00-0.55477427E-04 0.10524960E-07-0.73279132E-12    2
-0.64717898E+05 0.14264798E+03-0.70437260E-01 0.13911021E+00-0.10498685E-03    3
 0.31592030E-07 0.10743019E-11-0.74499594E+05 0.45439999E+02                   4
c4h9coc5h10-3  11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
dec5*o8oo            c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
dec5*o6j8ooh         c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38343363E+05 0.37901070E+02-0.45693436E+00 0.14243297E+00-0.11859096E-03    3
 0.49625644E-07-0.66309679E-11-0.41202746E+05 0.42964340E+02                   4
dec5*o6oo8ooh        c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49842552E+02                   4
dec5*o8*o6ooh        c  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14980563E+02 0.12761715E+00-0.55477427E-04 0.10524960E-07-0.73279132E-12    2
-0.64717898E+05 0.14264798E+03-0.70437260E-01 0.13911021E+00-0.10498685E-03    3
 0.31592030E-07 0.10743019E-11-0.74499594E+05 0.45439999E+02                   4
c2h5coc7h14-5  11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
dec3*o6oo            c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
dec3*o4j6ooh         c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38343363E+05 0.37901070E+02-0.45693436E+00 0.14243297E+00-0.11859096E-03    3
 0.49625644E-07-0.66309679E-11-0.41202746E+05 0.42964340E+02                   4
dec3*o4oo6ooh        c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49842552E+02                   4
dec3*o6*o4ooh        c  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14980563E+02 0.12761715E+00-0.55477427E-04 0.10524960E-07-0.73279132E-12    2
-0.64717898E+05 0.14264798E+03-0.70437260E-01 0.13911021E+00-0.10498685E-03    3
 0.31592030E-07 0.10743019E-11-0.74499594E+05 0.45439999E+02                   4
Fc10h19oB      11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16329407E+02 0.63091114E-01-0.21706626E-04 0.34954499E-08-0.21696413E-12    2
-0.28393789E+05-0.42317795E+02-0.17287970E+01 0.12794283E+00-0.10541788E-03    3
 0.50665591E-07-0.10489309E-10-0.24595764E+05 0.46272469E+02                   4
Bc10h19oF      11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.41005588E+01 0.83268210E-01-0.31393880E-04 0.53888471E-08-0.34954036E-12    2
-0.23567004E+05 0.26396599E+02-0.98894167E+00 0.12397141E+00-0.94435469E-04    3
 0.36740563E-07-0.43268960E-11-0.24857701E+05 0.42914986E+02                   4
Gc10h19oC      11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.42453704E+01 0.82912691E-01-0.31188483E-04 0.53431251E-08-0.34600122E-12    2
-0.23570279E+05 0.25720589E+02-0.22029736E+01 0.13251169E+00-0.11369693E-03    3
 0.54527877E-07-0.10232525E-10-0.24737500E+05 0.47996113E+02                   4
Hc10h19oD      11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
c10h19oBqjA  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13514616E+02 0.75880781E-01-0.27536711E-04 0.46022413E-08-0.29303906E-12    2
-0.42432004E+05-0.20841217E+02 0.50051504E+00 0.12957905E+00-0.91704926E-04    3
 0.29407795E-07-0.16656370E-11-0.40804504E+05 0.39517471E+02                   4
c10h19oAqjB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.60648933E+02 0.65077269E-02-0.59652689E-06 0.37715775E-10-0.14474208E-14    2
-0.52604367E+05-0.28855515E+03 0.20104423E+01 0.11726599E+00-0.63283944E-04    3
 0.11944034E-07-0.13398450E-11-0.31158100E+05 0.33456493E+02                   4
c10h19oCqjB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.58775883E+01 0.89733183E-01-0.34518202E-04 0.60115530E-08-0.39402455E-12    2
-0.41573852E+05 0.21084419E+02-0.19661069E+01 0.13946027E+00-0.10070876E-03    3
 0.29663784E-07 0.17849543E-12-0.42557738E+05 0.50607735E+02                   4
c10h19oBqjC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.55774834E+02 0.12417244E-01-0.17775797E-05 0.14284891E-09-0.52159683E-14    2
-0.62228688E+05-0.26099207E+03 0.14174898E+01 0.11821154E+00-0.63301130E-04    3
 0.99802486E-08 0.23630991E-12-0.42768293E+05 0.36123112E+02                   4
c10h19oDqjC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.60646033E+01 0.89415371E-01-0.34357283E-04 0.59785323E-08-0.39161583E-12    2
-0.41647551E+05 0.20039452E+02-0.20407033E+01 0.13998796E+00-0.10200999E-03    3
 0.31003356E-07-0.31151552E-12-0.42549863E+05 0.50921062E+02                   4
c10h19oCqjD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61545506E+01 0.89246392E-01-0.34245953E-04 0.59498162E-08-0.38910959E-12    2
-0.41683676E+05 0.19539101E+02-0.19393798E+01 0.13927017E+00-0.10024765E-03    3
 0.29206463E-07 0.33724485E-12-0.42560500E+05 0.50493259E+02                   4
c10h19oEqjD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.60646033E+01 0.89415371E-01-0.34357283E-04 0.59785323E-08-0.39161583E-12    2
-0.41647551E+05 0.20038933E+02-0.20407033E+01 0.13998796E+00-0.10200999E-03    3
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
dec2*o5oo            c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
dec2*o3j5ooh         c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38343363E+05 0.37901070E+02-0.45693436E+00 0.14243297E+00-0.11859096E-03    3
 0.49625644E-07-0.66309679E-11-0.41202746E+05 0.42964340E+02                   4
dec2*o3oo5ooh        c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49842552E+02                   4
dec2*o5*o3ooh        c  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14980563E+02 0.12761715E+00-0.55477427E-04 0.10524960E-07-0.73279132E-12    2
-0.64717898E+05 0.14264798E+03-0.70437260E-01 0.13911021E+00-0.10498685E-03    3
 0.31592030E-07 0.10743019E-11-0.74499594E+05 0.45439999E+02                   4
c5h11coc4h8-2  11/21/07 c  10h  19o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.44738827E+01 0.82529798E-01-0.31001735E-04 0.53062750E-08-0.34340862E-12    2
-0.23660557E+05 0.24443855E+02-0.23058853E+01 0.13325629E+00-0.11556858E-03    3
 0.56483582E-07-0.10955957E-10-0.24726898E+05 0.48427807E+02                   4
dec5*o2oo            c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
dec5*o4j2ooh         c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38343363E+05 0.37901070E+02-0.45693436E+00 0.14243297E+00-0.11859096E-03    3
 0.49625644E-07-0.66309679E-11-0.41202746E+05 0.42964340E+02                   4
dec5*o4oo2ooh        c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49842552E+02                   4
dec2*o5*o4ooh        c  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.14980563E+02 0.12761715E+00-0.55477427E-04 0.10524960E-07-0.73279132E-12    2
-0.64717898E+05 0.14264798E+03-0.70437260E-01 0.13911021E+00-0.10498685E-03    3
 0.31592030E-07 0.10743019E-11-0.74499594E+05 0.45439999E+02                   4
c8ald3oxo  29/05/06    c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.75483012E+01 0.88001356E-01-0.37421298E-04 0.69898851E-08-0.48127431E-12    2
-0.48668629E+05 0.87982437E+02-0.15627837E+01 0.99222884E-01-0.67715933E-04    3
 0.18561890E-07 0.89465843E-12-0.53334887E+05 0.46360420E+02                   4
c7ald3oxo   29/05/06    c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.94036551E+01 0.82001582E-01-0.35512909E-04 0.67193024E-08-0.46691893E-12    2
-0.45254449E+05 0.95854774E+02-0.13707602E+01 0.87533154E-01-0.61154518E-04    3
 0.17658323E-07 0.52635457E-12-0.50439336E+05 0.43760078E+02                   4
c6ald3oxo  29/05/06    c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11191474E+02 0.75941749E-01-0.33618278E-04 0.64603078E-08-0.45396651E-12    2
-0.41875945E+05 0.10332356E+03-0.10716561E+01 0.75103901E-01-0.52827163E-04    3
 0.15004920E-07 0.77228187E-12-0.47555281E+05 0.40705853E+02                   4
c5ald3oxo  29/05/06    c   5h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.12940953E+02 0.69903918E-01-0.31803214E-04 0.62314123E-08-0.44409864E-12    2
-0.38527070E+05 0.11053633E+03-0.84370774E+00 0.63168347E-01-0.45684359E-04    3
 0.13530840E-07 0.60230298E-12-0.44663621E+05 0.37952915E+02                   4
c4ald3oxo  29/05/06    c   4h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11254543E+01 0.39765101E-01-0.16878952E-04 0.31484686E-08-0.21655221E-12    2
-0.40318285E+05 0.42259468E+02-0.60580101E-01 0.46090852E-01-0.28861905E-04    3
 0.67779320E-08 0.68161687E-12-0.41638715E+05 0.33134945E+02                   4
mecomeco   07/06/06    c   4h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11254543E+01 0.39765101E-01-0.16878952E-04 0.31484686E-08-0.21655221E-12    2
```

```
c10h19oCqjF    11/16/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878191E+05 0.40099800E+02-0.90288764E+00 0.13731328E+00-0.10141730E-03    3
 0.31999924E-07-0.62966440E-12-0.43526574E+05 0.45301575E+02                   4
c10h19oDqjG    11/15/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878191E+05 0.40100044E+02-0.90288764E+00 0.13731328E+00-0.10141730E-03    3
 0.31999924E-07-0.62966440E-12-0.43526574E+05 0.45301815E+02                   4
c10h19oEqjA    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.65662427E+01 0.87472498E-01-0.33205844E-04 0.57277765E-08-0.37281799E-12    2
-0.40274926E+05 0.18260353E+02-0.45374015E+00 0.13326257E+00-0.95427269E-04    3
 0.29238231E-07-0.50864738E-12-0.41259953E+05 0.44270462E+02                   4
c10h19oAqjE    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13610016E+02 0.76522157E-01-0.27962642E-04 0.46960809E-08-0.30001313E-12    2
-0.41543164E+05-0.21350891E+02-0.46365151E+00 0.13528731E+00-0.98818942E-04    3
 0.32566334E-07-0.20572838E-11-0.39849418E+05 0.43678791E+02                   4
c10h19oBqjF    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14841763E+02 0.74333802E-01-0.26906631E-04 0.44921018E-08-0.28598269E-12    2
-0.45736117E+05-0.28880478E+02-0.39557856E+00 0.13248168E+00-0.92418610E-04    3
 0.27326923E-07-0.56672630E-12-0.43387945E+05 0.43442039E+02                   4
c10h19oFqjB    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.41149848E+05 0.40102135E+02-0.94730365E+00 0.13762265E+00-0.10216190E-03    3
 0.32743547E-07-0.89276378E-12-0.43793590E+05 0.45491550E+02                   4
c10h19oCqjG    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878191E+05 0.40100044E+02-0.90288764E+00 0.13731328E+00-0.10141730E-03    3
 0.31999924E-07-0.62966440E-12-0.43526574E+05 0.45301815E+02                   4
c10h19oDqjH    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.25660179E+01 0.94763122E-01-0.36931320E-04 0.64882340E-08-0.42774326E-12    2
-0.40878246E+05 0.40100426E+02-0.87275076E+00 0.13710858E+00-0.10093494E-03    3
 0.31526415E-07-0.46446598E-12-0.43529867E+05 0.45174076E+02                   4
Dc10h18oAqB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.60599445E+02 0.58821747E-02-0.44944431E-06 0.17142546E-10-0.72376947E-16    2
 0.00000000E+00-0.28407672E+03 0.20562611E+01 0.12623727E+00-0.92457078E-04    3
 0.41620812E-07-0.11393483E-10 0.00000000E+00 0.34954460E+02                   4
Ec10h18oAqB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.60599445E+02 0.58821747E-02-0.44944431E-06 0.17142546E-10-0.72376947E-16    2
-0.54644359E+05-0.28407672E+03 0.20562611E+01 0.12623727E+00-0.92457078E-04    3
 0.41620812E-07-0.11393483E-10-0.33731750E+05 0.34954460E+02                   4
Ec10h18oAqC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14546657E+02 0.73870048E-01-0.26529617E-04 0.44021791E-08-0.27893375E-12    2
-0.35768750E+05-0.22215637E+02-0.20842986E-01 0.14151256E+00-0.12141731E-03    3
 0.55703882E-07-0.98050639E-11-0.34313473E+05 0.43495388E+02                   4
Fc10h18oAqC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14546657E+02 0.73870048E-01-0.26529617E-04 0.44021791E-08-0.27893375E-12    2
-0.35768750E+05-0.22215637E+02-0.20842986E-01 0.14151256E+00-0.12141731E-03    3
 0.55703882E-07-0.98050639E-11-0.34313473E+05 0.43495388E+02                   4
Bc10h18oAqD  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14255374E+02 0.75461350E-01-0.27449150E-04 0.45948343E-08-0.29286954E-12    2
-0.38998758E+05-0.23176147E+02 0.57834171E-01 0.13970569E+00-0.11414410E-03    3
 0.48271708E-07-0.73655058E-11-0.37529762E+05 0.41209316E+02                   4
Bc10h18oAqE    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14255374E+02 0.75461350E-01-0.27449150E-04 0.45948343E-08-0.29286954E-12    2
-0.38998938E+05-0.23179688E+02 0.16272843E+00 0.13898553E+00-0.11243141E-03    3
 0.46577767E-07-0.67708495E-11-0.37541094E+05 0.40760990E+02                   4
Cc10h18oBqA  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14198792E+02 0.74763820E-01-0.27000528E-04 0.44973345E-08-0.28568757E-12    2
-0.39901023E+05-0.23118027E+02 0.12420368E+01 0.13265531E+00-0.10400027E-03    3
 0.42199478E-07-0.59688907E-11-0.38512324E+05 0.35845871E+02                   4
Ac10h18oBqC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.56340324E+02 0.12135333E-01-0.17993489E-05 0.16293901E-09-0.73292118E-14    2
-0.56703797E+05-0.26212399E+03 0.15854706E+01 0.12294850E+00-0.75737364E-04    3
 0.21558483E-07-0.35200673E-11-0.37355852E+05 0.36011333E+02                   4
Ac10h18oBqD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15952545E+02 0.73044427E-01-0.26332393E-04 0.43786748E-08-0.27772118E-12    2
-0.40420672E+05-0.33029037E+02 0.12179019E+00 0.13480555E+00-0.99087389E-04    3
 0.33180289E-07-0.23086483E-11-0.38013031E+05 0.41849510E+02                   4
Ac10h18oBqE  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15898907E+02 0.73133916E-01-0.26375337E-04 0.43870805E-08-0.27831283E-12    2
-0.40399023E+05-0.32727936E+02-0.16672114E+00 0.13680126E+00-0.10386469E-03    3
 0.37928814E-07-0.39814389E-11-0.37982094E+05 0.43072025E+02                   4
Cc10h18oBqE  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15558794E+02 0.73151924E-01-0.26324526E-04 0.43747899E-08-0.27751599E-12    2
-0.43218672E+05-0.31316864E+02 0.27545649E+00 0.13600235E+00-0.10571947E-03    3
 0.41076461E-07-0.51956824E-11-0.41087348E+05 0.40099388E+02                   4
Cc10h18oBqF    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15558794E+02 0.73151924E-01-0.26324526E-04 0.43747899E-08-0.27751599E-12    2
-0.43218340E+05-0.31327682E+02 0.81102572E-01 0.13734944E+00-0.10895258E-03    3
 0.44300272E-07-0.63352912E-11-0.41066539E+05 0.40910889E+02                   4
Dc10h18oCqA  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.72290835E+01 0.86372748E-01-0.32662851E-04 0.56188876E-08-0.36503409E-12    2
-0.37732309E+05 0.16135651E+02 0.17851977E+00 0.13708742E+00-0.10948983E-03    3
 0.43761226E-07-0.54134778E-11-0.38955988E+05 0.41086044E+02                   4
Dc10h18oCqB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.65944180E+01 0.88532999E-01-0.33913569E-04 0.58878178E-08-0.38501594E-12    2
-0.39051668E+05 0.18659958E+02-0.15769581E+01 0.14496662E+00-0.11879877E-03    3
 0.48195162E-07-0.61409055E-11-0.40227695E+05 0.48451332E+02                   4
Ec10h18oCqB            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.69647241E+01 0.86744048E-01-0.32841890E-04 0.56553571E-08-0.36771354E-12    2
-0.35847066E+05 0.19415245E+02-0.20632010E+01 0.14942405E+00-0.13226985E-03    3
 0.61728009E-07-0.10721295E-10-0.36963934E+05 0.52709446E+02                   4
Ac10h18oCqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.73542495E+01 0.86708277E-01-0.32919601E-04 0.56795244E-08-0.36976224E-12    2
-0.34938070E+05 0.16936989E+02-0.15978953E+01 0.14523955E+00-0.11959933E-03    3
 0.48333071E-07-0.59917427E-11-0.35897301E+05 0.50772453E+02                   4
Bc10h18oCqD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.64731550E+01 0.88830590E-01-0.34062603E-04 0.59157754E-08-0.38682241E-12    2
-0.39060289E+05 0.19391937E+02-0.41643575E+00 0.13666579E+00-0.99938828E-04    3
 0.30683797E-07-0.29701252E-12-0.40339523E+05 0.43808002E+02                   4
Fc10h18oCqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71546578E+01 0.86415119E-01-0.32664215E-04 0.56163243E-08-0.36468531E-12    2
-0.35922336E+05 0.18356186E+02-0.21712713E+01 0.15017383E+00-0.13407606E-03    3
 0.63541158E-07-0.11368016E-10-0.36952352E+05 0.53167191E+02                   4
Gc10h18oCqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71546578E+01 0.86415119E-01-0.32664215E-04 0.56163243E-08-0.36468531E-12    2
-0.35922336E+05 0.18356186E+02-0.21712713E+01 0.15017383E+00-0.13407606E-03    3
 0.63541158E-07-0.11368016E-10-0.36952352E+05 0.53167191E+02                   4
Bc10h18oCqE  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.28939755E+01 0.94326168E-01-0.36732945E-04 0.64502053E-08-0.42510296E-12    2
-0.38257852E+05 0.39902428E+02 0.72944432E+00 0.13394178E+00-0.99246492E-04    3
 0.31601722E-07-0.59498337E-12-0.41317180E+05 0.38154263E+02                   4
Dc10h18oCqF    11/16/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.33085968E+01 0.93511283E-01-0.36292822E-04 0.63560823E-08-0.41803033E-12    2
-0.38366004E+05 0.37532394E+02-0.32090518E+00 0.14147466E+00-0.11628061E-03    3
 0.47320416E-07-0.58166809E-11-0.41216949E+05 0.42329502E+02                   4
Dc10h18oCqG    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.33085968E+01 0.93511283E-01-0.36292822E-04 0.63560823E-08-0.41803033E-12    2
-0.38366336E+05 0.37516663E+02-0.11904581E+00 0.14007202E+00-0.11290659E-03    3
 0.43949530E-07-0.46229813E-11-0.41238508E+05 0.41460224E+02                   4
Cc10h18oDqA  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.73698988E+01 0.86120814E-01-0.32514119E-04 0.55835496E-08-0.36211965E-12    2
-0.37788367E+05 0.15373085E+02 0.55137757E-01 0.13794428E+00-0.11155384E-03    3
 0.45826575E-07-0.61457892E-11-0.38942785E+05 0.41629635E+02                   4
Ec10h18oDqA  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.72222729E+01 0.86384416E-01-0.32669497E-04 0.56204219E-08-0.36515777E-12    2
-0.37729492E+05 0.16169785E+02 0.15555625E+00 0.13724647E+00-0.10987398E-03    3
 0.44147157E-07-0.55508731E-11-0.38953516E+05 0.41179298E+02                   4
Ec10h18oDqB  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32401638E+01 0.93631983E-01-0.36363053E-04 0.63725580E-08-0.41937466E-12    2
-0.38609523E+05 0.37914436E+02-0.44938350E+00 0.14237297E+00-0.11843431E-03    3
 0.49459938E-07-0.65697335E-11-0.41475156E+05 0.42870693E+02                   4
Ac10h18oDqC            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.76534152E+01 0.86182326E-01-0.32621298E-04 0.56110112E-08-0.36425523E-12    2
 0.00000000E+00 0.15269066E+02-0.16669183E+01 0.14572233E+00-0.12077184E-03    3
 0.49518643E-07-0.64172057E-11 0.00000000E+00 0.51064266E+02                   4
Ec10h18oDqC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.68871927E+01 0.88027030E-01-0.33642151E-04 0.58286367E-08-0.38045519E-12    2
-0.39167941E+05 0.17022377E+02-0.15876504E+01 0.14504860E+00-0.11902453E-03    3
 0.48456805E-07-0.62480494E-11-0.40226617E+05 0.48491642E+02                   4
Fc10h18oDqC            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71495996E+01 0.86431995E-01-0.32685606E-04 0.56236060E-08-0.36541709E-12    2
-0.35920445E+05 0.18382072E+02-0.20331578E+01 0.14923453E+00-0.13186740E-03    3
 0.61383815E-07-0.10620530E-10-0.36967391E+05 0.52579723E+02                   4
Bc10h18oDqE            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.68487387E+01 0.87025613E-01-0.32969456E-04 0.56759797E-08-0.36878717E-12    2
-0.35856180E+05 0.19934212E+02-0.71808606E+00 0.13993905E+00-0.11064574E-03    3
 0.41486828E-07-0.39139542E-11-0.37097676E+05 0.47077896E+02                   4
Cc10h18oDqE  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.67691369E+01 0.88221565E-01-0.33733664E-04 0.58458682E-08-0.38160436E-12    2
-0.39121492E+05 0.17693909E+02-0.17360258E+01 0.14602192E+00-0.12127692E-03    3
 0.50634796E-07-0.69964967E-11-0.40209672E+05 0.49140850E+02                   4
Gc10h18oDqE            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.70995660E+01 0.86506851E-01-0.32707172E-04 0.56243827E-08-0.36522274E-12    2
 0.00000000E+00 0.18662491E+02-0.18741750E+01 0.14811198E+00-0.12911898E-03    3
 0.58587037E-07-0.96119623E-11 0.00000000E+00 0.51909134E+02                   4
Hc10h18oDqE            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.70995660E+01 0.86506851E-01-0.32707172E-04 0.56243827E-08-0.36522274E-12    2
-0.35901258E+05 0.18662491E+02-0.18741750E+01 0.14811198E+00-0.12911898E-03    3
 0.58587037E-07-0.96119623E-11-0.36984129E+05 0.51909134E+02                   4
Cc10h18oDqF  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32387693E+01 0.93634509E-01-0.36364861E-04 0.63730714E-08-0.41942353E-12    2
-0.38337941E+05 0.37932343E+02-0.53388560E+00 0.14292596E+00-0.11973565E-03    3
 0.50748366E-07-0.70242085E-11-0.41193621E+05 0.43246284E+02                   4
Ec10h18oDqG    11/15/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32744839E+01 0.93571454E-01-0.36327830E-04 0.63642958E-08-0.41870047E-12    2
-0.38351871E+05 0.37750641E+02-0.35759521E+00 0.14173228E+00-0.11689104E-03    3
 0.47917705E-07-0.60237106E-11-0.41213148E+05 0.42511047E+02                   4
Ec10h18oDqH    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32744839E+01 0.93571454E-01-0.36327830E-04 0.63642958E-08-0.41870047E-12    2
-0.38351961E+05 0.37735275E+02-0.31317922E+00 0.14142290E+00-0.11614645E-03    3
 0.47174080E-07-0.57606112E-11-0.41217875E+05 0.42308041E+02                   4
Dc10h18oEqA  11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.72290835E+01 0.86372748E-01-0.32662851E-04 0.56188876E-08-0.36503409E-12    2
-0.37732016E+05 0.16155029E+02 0.10366401E-01 0.13826062E+00-0.11232212E-03    3
 0.46599517E-07-0.64210386E-11-0.38938105E+05 0.41815704E+02                   4
Dc10h18oEqB  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.33501017E+01 0.93438067E-01-0.36252663E-04 0.63471268E-08-0.41732514E-12    2
-0.38653293E+05 0.37385391E+02-0.41997668E+00 0.14218388E+00-0.11801054E-03    3
 0.49063939E-07-0.64381027E-11-0.41478547E+05 0.42827549E+02                   4
Fc10h18oEqB  11/30/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32731922E+01 0.93575150E-01-0.36333338E-04 0.63662391E-08-0.41889764E-12    2
-0.38622438E+05 0.37733849E+02-0.55803108E+00 0.14312850E+00-0.12025888E-03    3
 0.51291686E-07-0.72215862E-11-0.41463535E+05 0.43333958E+02                   4
Fc10h18oEqC  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32731922E+01 0.93575150E-01-0.36333338E-04 0.63662391E-08-0.41889764E-12    2
-0.38350699E+05 0.37733849E+02-0.55803108E+00 0.14312850E+00-0.12025888E-03    3
 0.51291686E-07-0.72215862E-11-0.41191793E+05 0.43333958E+02                   4
Ac10h18oEqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.76534152E+01 0.86182326E-01-0.32621298E-04 0.56110112E-08-0.36425523E-12    2
-0.35057488E+05 0.15269066E+02-0.16669183E+01 0.14572233E+00-0.12077184E-03    3
 0.49518643E-07-0.64172057E-11-0.35889965E+05 0.51064266E+02                   4
Bc10h18oEqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71495996E+01 0.86431995E-01-0.32685606E-04 0.56236060E-08-0.36541709E-12    2
-0.35920445E+05 0.18382072E+02-0.20331578E+01 0.14923453E+00-0.13186740E-03    3
 0.61383815E-07-0.10620530E-10-0.36967391E+05 0.52579723E+02                   4
Fc10h18oEqD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.68735709E+01 0.88050365E-01-0.33655444E-04 0.58317053E-08-0.38070260E-12    2
-0.39162367E+05 0.17101906E+02-0.15892798E+01 0.14505927E+00-0.11905435E-03    3
 0.48492041E-07-0.62624372E-11-0.40226406E+05 0.48502068E+02                   4
Gc10h18oEqD            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.71495996E+01 0.86431995E-01-0.32685606E-04 0.56236060E-08-0.36541709E-12    2
-0.35920445E+05 0.18382072E+02-0.20331578E+01 0.14923453E+00-0.13186740E-03    3
 0.61383815E-07-0.10620530E-10-0.36967391E+05 0.52579723E+02                   4
Cc10h18oEqF            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.70995660E+01 0.86506851E-01-0.32707172E-04 0.56243827E-08-0.36522274E-12    2
-0.35901258E+05 0.18662491E+02-0.18741750E+01 0.14811198E+00-0.12911898E-03    3
 0.58587037E-07-0.96119623E-11-0.36984129E+05 0.51909134E+02                   4
Dc10h18oEqF            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.67325392E+01 0.88289700E-01-0.33775170E-04 0.58559695E-08-0.38245299E-12    2
-0.39107113E+05 0.17884216E+02-0.16175516E+01 0.14523797E+00-0.11945122E-03    3
 0.48855718E-07-0.63791572E-11-0.40223070E+05 0.48620285E+02                   4
Hc10h18oEqF            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.70995660E+01 0.86506851E-01-0.32707172E-04 0.56243827E-08-0.36522274E-12    2
-0.35901258E+05 0.18662491E+02-0.18741750E+01 0.14811198E+00-0.12911898E-03    3
 0.58587037E-07-0.96119623E-11-0.36984129E+05 0.51909134E+02                   4
Ic10h18oEqF            c  10h  19o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.68487387E+01 0.87025613E-01-0.32969456E-04 0.56759797E-08-0.36878717E-12    2
-0.35856180E+05 0.19934212E+02-0.71808606E+00 0.13993905E+00-0.11064574E-03    3
 0.41486828E-07-0.39139542E-11-0.37097676E+05 0.47077896E+02                   4
Ec10h18oFqB    11/21/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32537854E+01 0.93608648E-01-0.36349764E-04 0.63694889E-08-0.41912724E-12    2
-0.38615461E+05 0.37889351E+02-0.24999976E+00 0.14099425E+00-0.11512834E-03    3
 0.46164512E-07-0.54048246E-11-0.41496574E+05 0.42077744E+02                   4
Ec10h18oFqC    11/16/07 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.33501017E+01 0.93438067E-01-0.36252663E-04 0.63471268E-08-0.41732514E-12    2
-0.38381418E+05 0.37365021E+02-0.50221032E+00 0.14274554E+00-0.11933968E-03    3
 0.50372538E-07-0.68955818E-11-0.41197871E+05 0.43156319E+02                   4
Gc10h18oFqD  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.32542059E+01 0.93609728E-01-0.36354275E-04 0.63713381E-08-0.41932763E-12    2
-0.38344199E+05 0.37832527E+02-0.13775460E+00 0.14020605E+00-0.11323849E-03    3
 0.44290388E-07-0.47468986E-11-0.41236574E+05 0.41551350E+02                   4
Dc10h18oFqE  11/29/2007 c  10h  19o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.67325392E+01 0.88289700E-01-0.33775170E-04 0.58559695E-08-0.38245299E-12    2
-0.39107113E+05 0.17884216E+02-0.16175516E+01 0.14523797E+00-0.11945122E-03    3
 0.48855718E-07-0.63791572E-11-0.40223070E+05 0.48620285E+02                   4
c10h18oAqBqjD   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16474442E+02 0.80075324E-01-0.29432053E-04 0.49616555E-08-0.31774258E-12    2
-0.53876559E+05-0.28459229E+02-0.26915088E+00 0.15181664E+00-0.11646116E-03    3
 0.38824126E-07-0.22071060E-11-0.52081664E+05 0.48159500E+02                   4
c10h18oAqBqjE   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16474442E+02 0.80075324E-01-0.29432053E-04 0.49616555E-08-0.31774258E-12    2
-0.53876559E+05-0.28459183E+02-0.26915088E+00 0.15181664E+00-0.11646116E-03    3
 0.38824126E-07-0.22071060E-11-0.52081664E+05 0.48159554E+02                   4
```

```
c10h18oAqCqjE   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.12990152E+02 0.85343204E-01-0.31927571E-04 0.54501093E-08-0.35211520E-12    2
-0.53103340E+05-0.84511566E+01 0.12289592E+01 0.14663866E+00-0.10984705E-03    3
 0.33805943E-07-0.39617617E-12-0.53096863E+05 0.41015633E+02                   4
c10h18oAqCqjF   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.12990152E+02 0.85343204E-01-0.31927571E-04 0.54501093E-08-0.35211520E-12    2
-0.53103340E+05-0.91441040E+01 0.12289592E+01 0.14663866E+00-0.10984705E-03    3
 0.33805943E-07-0.39617617E-12-0.53096863E+05 0.40322689E+02                   4
c10h18oAqDqjB   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16474442E+02 0.80075324E-01-0.29432053E-04 0.49616555E-08-0.31774258E-12    2
-0.45724266E+05-0.29151047E+02-0.31377134E+00 0.15212741E+00-0.11720909E-03    3
 0.39571045E-07-0.24713645E-11-0.43924707E+05 0.47656193E+02                   4
c10h18oAqEqjB  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16474442E+02 0.80075324E-01-0.29432053E-04 0.49616555E-08-0.31774258E-12    2
-0.45724266E+05-0.29151047E+02-0.31377134E+00 0.15212741E+00-0.11720909E-03    3
 0.39571045E-07-0.24713645E-11-0.43924707E+05 0.47656193E+02                   4
c10h18oBqAqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16453438E+02 0.79322897E-01-0.28974737E-04 0.48669020E-08-0.31108156E-12    2
-0.54794824E+05-0.28370468E+02 0.10209477E+01 0.14386408E+00-0.10400395E-03    3
 0.30387369E-07 0.31546560E-13-0.53071832E+05 0.42614330E+02                   4
c10h18oBqCqjA   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.16453438E+02 0.79322897E-01-0.28974737E-04 0.48669020E-08-0.31108156E-12    2
-0.54794695E+05-0.29061523E+02 0.94619036E+00 0.14437956E+00-0.10523426E-03    3
 0.31607801E-07-0.39791079E-12-0.53063789E+05 0.42239914E+02                   4
c10h18oBqDqjA   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.12903053E+02 0.84676765E-01-0.31483654E-04 0.53521156E-08-0.34483557E-12    2
-0.53992492E+05-0.86731720E+01 0.19531467E+01 0.14260995E+00-0.10680299E-03    3
 0.34742559E-07-0.14641210E-11-0.54026488E+05 0.37175579E+02                   4
c10h18oBqEqjA   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13109145E+02 0.84327959E-01-0.31307645E-04 0.53159548E-08-0.34218667E-12    2
-0.54074977E+05-0.98265381E+01 0.23858290E+01 0.13962570E+00-0.99683646E-04    3
 0.27691881E-07 0.10102370E-11-0.54073000E+05 0.35341022E+02                   4
c10h18oBqEqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.17633001E+02 0.77989809E-01-0.28403843E-04 0.47584860E-08-0.30345380E-12    2
-0.58038805E+05-0.36265228E+02-0.21779743E+00 0.14909220E+00-0.11016779E-03    3
 0.33604319E-07-0.69386299E-12-0.55617922E+05 0.47305637E+02                   4
c10h18oBqFqjC  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.17633001E+02 0.77989809E-01-0.28403843E-04 0.47584860E-08-0.30345380E-12    2
-0.58038805E+05-0.35572144E+02-0.21779743E+00 0.14909220E+00-0.11016779E-03    3
 0.33604319E-07-0.69386299E-12-0.55617922E+05 0.47998718E+02                   4
c10h18oCqAqjD   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634867E+05 0.10797241E+02-0.15589896E+00 0.14909208E+00-0.11143288E-03    3
 0.33909693E-07-0.11426500E-12-0.53503484E+05 0.48311241E+02                   4
c10h18oCqBqjD   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61390350E+02 0.11732307E-01-0.16209029E-05 0.13397226E-09-0.54465523E-14    2
-0.75733344E+05-0.28335376E+03 0.21573341E+01 0.13342541E+00-0.78780002E-04    3
 0.14127929E-07 0.69286428E-12-0.55265328E+05 0.37860649E+02                   4
c10h18oCqBqjE          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.51436539E+01 0.98838240E-01-0.38697381E-04 0.68202568E-08-0.45062961E-12    2
-0.53102488E+05 0.34578133E+02-0.74260104E+00 0.15404968E+00-0.11947558E-03    3
 0.38588965E-07-0.86721483E-12-0.55754754E+05 0.49931187E+02                   4
c10h18oCqDqjA          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634680E+05 0.10105682E+02-0.26058877E+00 0.14981085E+00-0.11314222E-03    3
 0.35600333E-07-0.70776165E-12-0.53492172E+05 0.48063580E+02                   4
c10h18oCqDqjB   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61390350E+02 0.11732307E-01-0.16209029E-05 0.13397226E-09-0.54465523E-14    2
-0.75732812E+05-0.28404303E+03 0.18619918E+01 0.13548641E+00-0.83757448E-04    3
 0.19118190E-07-0.10794259E-11-0.55233918E+05 0.38418903E+02                   4
c10h18oCqDqjF          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224273E+05 0.32169853E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756500E+05 0.49178181E+02                   4
c10h18oCqDqjG          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224328E+05 0.32170006E+02-0.69901693E+00 0.15377508E+00-0.11888976E-03    3
 0.38081197E-07-0.71485949E-12-0.55759793E+05 0.49050201E+02                   4
c10h18oCqEqjB   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.51436539E+01 0.98838240E-01-0.38697381E-04 0.68202568E-08-0.45062961E-12    2
-0.53102312E+05 0.33887901E+02-0.84729081E+00 0.15476845E+00-0.12118494E-03    3
 0.40279598E-07-0.14607114E-11-0.55743441E+05 0.49684860E+02                   4
c10h18oCqFqjD  11/16/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224273E+05 0.32862938E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756500E+05 0.49871265E+02                   4
c10h18oCqGqjD  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224273E+05 0.32862938E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756500E+05 0.49871265E+02                   4
c10h18oDqAqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634680E+05 0.10797882E+02-0.26058877E+00 0.14981085E+00-0.11314222E-03    3
 0.35600333E-07-0.70776165E-12-0.53492172E+05 0.48755787E+02                   4
c10h18oDqAqjE   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634859E+05 0.10104218E+02-0.15589896E+00 0.14909208E+00-0.11143288E-03    3
 0.33909693E-07-0.11426500E-12-0.53503477E+05 0.47618214E+02                   4
c10h18oDqBqjE   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54605327E+01 0.98287731E-01-0.38398270E-04 0.67543424E-08-0.44551006E-12    2
-0.53500074E+05 0.32810768E+02-0.70271552E+00 0.15378655E+00-0.11888209E-03    3
 0.38039776E-07-0.68907336E-12-0.56030941E+05 0.49760487E+02                   4
c10h18oDqCqjA          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634680E+05 0.10104950E+02-0.26058877E+00 0.14981085E+00-0.11314222E-03    3
 0.35600333E-07-0.70776165E-12-0.53492172E+05 0.48062840E+02                   4
c10h18oDqCqjE   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61386299E+02 0.11739532E-01-0.16251262E-05 0.13494919E-09-0.55245877E-14    2
-0.75731508E+05-0.28333060E+03 0.20392663E+01 0.13424979E+00-0.80772734E-04    3
 0.16127400E-07-0.17560843E-13-0.55252773E+05 0.38359943E+02                   4
c10h18oDqCqjF          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224281E+05 0.32169853E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756500E+05 0.49178181E+02                   4
c10h18oDqEqjB          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54605327E+01 0.98287731E-01-0.38398270E-04 0.67543424E-08-0.44551006E-12    2
-0.53500230E+05 0.32119606E+02-0.60207868E+00 0.15308423E+00-0.11718505E-03    3
 0.36337436E-07-0.84210782E-13-0.56041648E+05 0.48644169E+02                   4
c10h18oDqEqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61386299E+02 0.11739532E-01-0.16251262E-05 0.13494919E-09-0.55245877E-14    2
-0.75731555E+05-0.28402283E+03 0.20694032E+01 0.13404509E+00-0.80290360E-04    3
 0.15653896E-07 0.14763664E-12-0.55256066E+05 0.37539577E+02                   4
c10h18oDqEqjG          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894958E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49843021E+02                   4
c10h18oDqEqjH          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171500E+05 0.32895889E+02-0.96090257E+00 0.15558614E+00-0.12322681E-03    3
 0.42397314E-07-0.22380229E-11-0.55731691E+05 0.50160587E+02                   4
c10h18oDqFqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
```

```
-0.53224145E+05 0.32864159E+02-0.80370677E+00 0.15449385E+00-0.12059910E-03    3
 0.39771830E-07-0.13083563E-11-0.55748488E+05 0.50188244E+02                   4
c10h18oDqGqjE  11/15/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.33587616E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.50535679E+02                   4
c10h18oDqHqjE  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.33587616E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.50535679E+02                   4
c10h18oEqAqjD  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634867E+05 0.10797272E+02-0.15589896E+00 0.14909208E+00-0.11143288E-03    3
 0.33909693E-07-0.11426500E-12-0.53503484E+05 0.48311275E+02                   4
c10h18oEqBqjD   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53443371E+05 0.33587601E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.56011469E+05 0.50535656E+02                   4
c10h18oEqBqjF   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53443379E+05 0.33587753E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.56011477E+05 0.50535820E+02                   4
c10h18oEqCqjF   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224281E+05 0.32169853E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756508E+05 0.49178181E+02                   4
c10h18oEqDqjA          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.94926062E+01 0.90945147E-01-0.34662495E-04 0.59959833E-08-0.39105522E-12    2
-0.52634867E+05 0.10104218E+02-0.15589896E+00 0.14909208E+00-0.11143288E-03    3
 0.33909693E-07-0.11426500E-12-0.53503484E+05 0.47618214E+02                   4
c10h18oEqDqjB          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53443293E+05 0.32897110E+02-0.93076569E+00 0.15538143E+00-0.12274444E-03    3
 0.41923805E-07-0.20728243E-11-0.56006719E+05 0.50033695E+02                   4
c10h18oEqDqjF   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61386299E+02 0.11739532E-01-0.16251262E-05 0.13494919E-09-0.55245877E-14    2
-0.75731508E+05-0.28402353E+03 0.20392663E+01 0.13424979E+00-0.80772734E-04    3
 0.16127400E-07-0.17560843E-13-0.55252773E+05 0.37667000E+02                   4
c10h18oEqDqjG          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224336E+05 0.32170006E+02-0.69901693E+00 0.15377508E+00-0.11888976E-03    3
 0.38081197E-07-0.71485949E-12-0.55759801E+05 0.49050201E+02                   4
c10h18oEqFqjC          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224145E+05 0.32864159E+02-0.80370677E+00 0.15449385E+00-0.12059910E-03    3
 0.39771830E-07-0.13083563E-11-0.55748488E+05 0.50188244E+02                   4
c10h18oEqFqjD          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.61386299E+02 0.11739532E-01-0.16251262E-05 0.13494919E-09-0.55245877E-14    2
-0.75731508E+05-0.28333017E+03 0.20392663E+01 0.13424979E+00-0.80772734E-04    3
 0.16127400E-07-0.17560843E-13-0.55252773E+05 0.38360367E+02                   4
c10h18oEqFqjH          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171500E+05 0.33588974E+02-0.96090257E+00 0.15558614E+00-0.12322681E-03    3
 0.42397314E-07-0.22380229E-11-0.55731691E+05 0.50853668E+02                   4
c10h18oEqFqjI          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53443293E+05 0.33590195E+02-0.93076569E+00 0.15538143E+00-0.12274444E-03    3
 0.41923805E-07-0.20728243E-11-0.56006719E+05 0.50726768E+02                   4
c10h18oFqBqjE  11/21/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53443371E+05 0.32894485E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
```

```
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.56011469E+05 0.49842552E+02                   4
c10h18oFqCqjE  11/16/07 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224273E+05 0.32862755E+02-0.72915387E+00 0.15397978E+00-0.11937213E-03    3
 0.38554703E-07-0.88005829E-12-0.55756500E+05 0.49871071E+02                   4
c10h18oFqDqjG   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
-0.53224336E+05 0.32170006E+02-0.69901693E+00 0.15377508E+00-0.11888976E-03    3
 0.38081197E-07-0.71485949E-12-0.55759801E+05 0.49050201E+02                   4
c10h18oFqEqjD   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.61386299E+02 0.11739532E-01-0.16251262E-05 0.13494919E-09-0.55245877E-14    2
-0.75731508E+05-0.28402283E+03 0.20694032E+01 0.13404509E+00-0.80290360E-04    3
 0.15653896E-07 0.14763664E-12-0.55256066E+05 0.37539577E+02                   4
c10h18oFqEqjG          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171633E+05 0.32894958E+02-0.88614529E+00 0.15507066E+00-0.12199651E-03    3
 0.41176886E-07-0.18085662E-11-0.55739730E+05 0.49843021E+02                   4
c10h18oFqEqjH          c  10h  19o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.53214493E+01 0.98535828E-01-0.38547452E-04 0.67903265E-08-0.44850804E-12    2
-0.53171500E+05 0.32895889E+02-0.96090257E+00 0.15558614E+00-0.12322681E-03    3
 0.42397314E-07-0.22380229E-11-0.55731691E+05 0.50160587E+02                   4
c10h18oFqFqjC   11/2007 c  10h  19o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.54511390E+01 0.98308004E-01-0.38416278E-04 0.67598243E-08-0.44603568E-12    2
```

```
c10h17oBoCqD   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.95124921E+01 4.26844104E-02-1.48804842E-05 2.34001885E-09-1.36982354E-13    2
-8.52472390E+04-1.66974008E+02-2.62149056E-01 1.35050100E-01-9.77631692E-05    3
 3.66981346E-08-5.69455455E-12-7.12905366E+04 4.69869443E+01                   4
c10h17oBoCqE             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71028810E+01 0.89390613E-01-0.35473688E-04 0.63137904E-08-0.42017916E-12    2
-0.70844172E+05 0.20173714E+02 0.10037415E+01 0.13263381E+00-0.92379792E-04    3
 0.23786642E-07 0.17729635E-11-0.72204766E+05 0.41142376E+02                   4
c10h17oBoDqA   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    11
 3.78866382E+01 4.39771934E-02-1.53042866E-05 2.40365170E-09-1.40578734E-13    2
-8.39655163E+04-1.56405626E+02 3.11020177E+00 1.22382642E-01-8.41051329E-05    3
 3.06817737E-08-4.75167551E-12-7.13842205E+04 3.17435602E+01                   4
c10h17oBoDqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    11
 3.94419108E+01 4.26985303E-02-1.48747863E-05 2.33799483E-09-1.36817528E-13    2
-8.69677177E+04-1.65781674E+02-1.51645934E+00 1.40279293E-01-1.05454142E-04    3
 4.13851709E-08-6.70949653E-12-7.28361707E+04 5.36820843E+01                   4
c10h17oBoEqA   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1381.000    11
 3.79733160E+01 4.31844556E-02-1.48775514E-05 2.32152913E-09-1.35183291E-13    2
-8.44877346E+04-1.56236006E+02 5.36194268E+00 1.17071384E-01-8.05196009E-05    3
 2.98621268E-08-4.74643620E-12-7.26900318E+04 2.01340920E+01                   4
c10h17oBoEqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.86520828E+01 4.33083649E-02-1.50689595E-05 2.36640022E-09-1.38387519E-13    2
-8.71908095E+04-1.60734897E+02 1.95635178E+00 1.30157937E-01-9.62116862E-05    3
 3.80817240E-08-6.34320086E-12-7.43374907E+04 3.63193794E+01                   4
c10h17oBoEqD   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.86520828E+01 4.33083649E-02-1.50689595E-05 2.36640022E-09-1.38387519E-13    2
-8.71908095E+04-1.60734897E+02 1.95635178E+00 1.30157937E-01-9.62116862E-05    3
 3.80817240E-08-6.34320086E-12-7.43374907E+04 3.63193794E+01                   4
c10h17oBoEqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.86520828E+01 4.33083649E-02-1.50689595E-05 2.36640022E-09-1.38387519E-13    2
-8.71908095E+04-1.60734897E+02 1.95635178E+00 1.30157937E-01-9.62116862E-05    3
 3.80817240E-08-6.34320086E-12-7.43374907E+04 3.63193794E+01                   4
c10h17oBoFqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.86520828E+01 4.33083649E-02-1.50689595E-05 2.36640022E-09-1.38387519E-13    2
-8.71908095E+04-1.60734897E+02 1.95635178E+00 1.30157937E-01-9.62116862E-05    3
 3.80817240E-08-6.34320086E-12-7.43374907E+04 3.63193794E+01                   4
c10h17oBoFqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.86520828E+01 4.33083649E-02-1.50689595E-05 2.36640022E-09-1.38387519E-13    2
-8.71908095E+04-1.60734897E+02 1.95635178E+00 1.30157937E-01-9.62116862E-05    3
 3.80817240E-08-6.34320086E-12-7.43374907E+04 3.63193794E+01                   4
c10h17oCoDqA             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19482636E+01 0.10426114E+00-0.42989239E-04 0.78558751E-08-0.53243396E-12    2
-0.65139734E+05 0.71452393E+02 0.10335819E+01 0.13277578E+00-0.93772374E-04    3
 0.23994774E-07 0.24671170E-11-0.70085820E+05 0.41601948E+02                   4
c10h17oCoDqB   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oCoDqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oCoDqF             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62567182E+01 0.11234336E+00-0.47342401E-04 0.87858343E-08-0.60207780E-12    2
-0.65660570E+05 0.94890877E+02 0.47916785E+00 0.13755016E+00-0.10148532E-03    3
 0.28462148E-07 0.17469227E-11-0.72341102E+05 0.43079655E+02                   4
c10h17oCoDqG             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62567182E+01 0.11234336E+00-0.47342401E-04 0.87858343E-08-0.60207780E-12    2
-0.65660570E+05 0.94890877E+02 0.47916785E+00 0.13755016E+00-0.10148532E-03    3
 0.28462148E-07 0.17469227E-11-0.72341102E+05 0.43079655E+02                   4
c10h17oCoEqB   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oCoEqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oCoGqD   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqG   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oDoEqA             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19482636E+01 0.10426114E+00-0.42989239E-04 0.78558751E-08-0.53243396E-12    2
-0.65139734E+05 0.71452408E+02 0.10335819E+01 0.13277578E+00-0.93772374E-04    3
 0.23994774E-07 0.24671170E-11-0.70085820E+05 0.41601963E+02                   4
c10h17oDoEqB             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62492933E+01 0.11233181E+00-0.47339068E-04 0.87857979E-08-0.60212469E-12    2
-0.65935414E+05 0.94848480E+02 0.69918442E+00 0.13604306E+00-0.97910379E-04    3
 0.24936071E-07 0.29812168E-11-0.72636648E+05 0.42145222E+02                   4
c10h17oDoEqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oDoEqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oDoEqG             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65649242E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72345383E+05 0.42916584E+02                   4
c10h17oDoEqH             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65649242E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72345383E+05 0.42916584E+02                   4
c10h17oDoFqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oDoFqG   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oDoGqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oEoFqC             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62567182E+01 0.11234336E+00-0.47342401E-04 0.87858343E-08-0.60207780E-12    2
```

```
-0.65660578E+05 0.94890877E+02 0.47916785E+00 0.13755016E+00-0.10148532E-03    3
 0.28462148E-07 0.17469227E-11-0.72341109E+05 0.43079666E+02                   4
c10h17oEoFqD   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oEoFqH             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65649242E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72345383E+05 0.42916584E+02                   4
c10h17oEoFqI             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65920969E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72617117E+05 0.42916584E+02                   4
c10h19o2h                c  10h  20o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24191536E+02 0.58517322E-01-0.20019606E-04 0.32116494E-08-0.19886355E-12    2
-0.38600027E+05-0.83529999E+02 0.63085027E+01 0.81952430E-01 0.24872594E-04    3
-0.84218343E-07 0.36872276E-10-0.32955344E+05 0.13995958E+02                   4
c10h21o2h                c  10h  22o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24345242E+02 0.63453369E-01-0.21726237E-04 0.34888712E-08-0.21625219E-12    2
-0.53959410E+05-0.84722061E+02 0.61041288E+01 0.87279841E-01 0.24273155E-04    3
-0.85926288E-07 0.37700999E-10-0.48194324E+05 0.14782654E+02                   4
c9h19hco                 c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20839981E+02 0.60064841E-01-0.20850150E-04 0.33759531E-08-0.21019722E-12    2
-0.50495207E+05-0.70039574E+02-0.10854400E+00 0.11496060E+00-0.64491447E-04    3
 0.86950944E-08 0.41273686E-11-0.44644766E+05 0.38735161E+02                   4
c9h19co                  c  10h  19o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21888067E+02 0.17680371E-01-0.45973793E-05 0.60718119E-09-0.32980075E-13    2
-0.31535605E+05-0.78729637E+02 0.63410324E+00 0.80357298E-01-0.71632960E-04    3
 0.30559153E-07-0.43843913E-11-0.25892623E+05 0.30032263E+02                   4
c10h20oB                 c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13747478E+02 0.71584202E-01-0.26332194E-04 0.44410999E-08-0.28447061E-12    2
-0.51337172E+05-0.30904594E+02-0.63701874E+00 0.11640445E+00-0.68654277E-04    3
 0.14442623E-07 0.15401825E-11-0.48120750E+05 0.41010777E+02                   4
c10h20oC                 c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.81930846E+00 0.93282141E-01-0.37148049E-04 0.66256969E-08-0.44146254E-12    2
-0.46241738E+05 0.41649971E+02-0.10791575E+01 0.12076402E+00-0.76462667E-04    3
 0.17865087E-07 0.19430779E-11-0.48266094E+05 0.42596947E+02                   4
c10h20oD                 c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10961013E+01 0.92808336E-01-0.36904414E-04 0.65751156E-08-0.43774514E-12    2
-0.46350773E+05 0.40106003E+02-0.10715234E+01 0.12073632E+00-0.76466269E-04    3
 0.17944974E-07 0.18868494E-11-0.48267242E+05 0.42561272E+02                   4
c10h20oE                 c  10h  20o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10961013E+01 0.92808336E-01-0.36904414E-04 0.65751156E-08-0.43774514E-12    2
-0.46350773E+05 0.40106003E+02-0.10715234E+01 0.12073632E+00-0.76466269E-04    3
 0.17944974E-07 0.18868494E-11-0.48267242E+05 0.42561272E+02                   4
c10h20rohAB 4/16/9 THERMc  10h  21o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.52860046E+02 0.13560716E-01-0.19652318E-05 0.15751621E-09-0.56206451E-14    2
-0.50503977E+05-0.24858864E+03-0.59233850E+00 0.12653472E+00-0.93318871E-04    3
 0.44129752E-07-0.12130841E-10-0.31655396E+05 0.41724075E+02                   4
c10h20qjohAB 4/15/9THERMc  10h  21o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.16675129E+02 0.76774716E-01-0.27434795E-04 0.45377662E-08-0.28695831E-12    2
-0.53213945E+05-0.38408905E+02-0.19030721E+01 0.14608902E+00-0.10599804E-03    3
 0.33820847E-07-0.17875002E-11-0.50125805E+05 0.50506203E+02                   4
c10h20rohBC 4/16/9 THERMc  10h  21o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.52860046E+02 0.13560716E-01-0.19652318E-05 0.15751621E-09-0.56206451E-14    2
-0.50775723E+05-0.24858864E+03-0.59233850E+00 0.12653472E+00-0.93318871E-04    3
 0.44129752E-07-0.12130841E-10-0.31927141E+05 0.41724075E+02                   4
c10h20qjohBC 4/15/9THERMc  10h  21o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.16665230E+02 0.76773152E-01-0.27408434E-04 0.45268536E-08-0.28579098E-12    2
-0.53481879E+05-0.38349960E+02-0.16218747E+01 0.14411019E+00-0.10117298E-03    3
```

```
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oCoEqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oCoGqD   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oCoGqG   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oDoEqA             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19482636E+01 0.10426114E+00-0.42989239E-04 0.78558751E-08-0.53243396E-12    2
-0.65139734E+05 0.71452408E+02 0.10335819E+01 0.13277578E+00-0.93772374E-04    3
 0.23994774E-07 0.24671170E-11-0.70085820E+05 0.41601963E+02                   4
c10h17oDoEqB             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62492933E+01 0.11233181E+00-0.47339068E-04 0.87857979E-08-0.60212469E-12    2
-0.65935414E+05 0.94848480E+02 0.69918442E+00 0.13604306E+00-0.97910379E-04    3
 0.24936071E-07 0.29812168E-11-0.72636648E+05 0.42145222E+02                   4
c10h17oDoEqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oDoEqF   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    11
 3.91266424E+01 4.29839191E-02-1.49760074E-05 2.35399258E-09-1.37754104E-13    2
-8.51512276E+04-1.64350512E+02 2.18463467E-01 1.35388150E-01-1.01088821E-04    3
 3.99146408E-08-6.57373036E-12-7.16216917E+04 4.43595421E+01                   4
c10h17oDoEqG             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65649242E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72345383E+05 0.42916584E+02                   4
c10h17oDoEqH             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62842727E+01 0.11239495E+00-0.47377875E-04 0.87953484E-08-0.60293328E-12    2
-0.65649242E+05 0.95044235E+02 0.51716882E+00 0.13730183E+00-0.10092570E-03    3
 0.27938320E-07 0.19210328E-11-0.72345383E+05 0.42916584E+02                   4
c10h17oDoFqC   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oDoFqG   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 3.90780846E+01 4.29714398E-02-1.49594215E-05 2.35009349E-09-1.37473091E-13    2
-8.68769480E+04-1.63275533E+02-8.66081751E-01 1.39878153E-01-1.07627262E-04    3
 4.38564812E-08-7.41891961E-12-7.31938766E+04 5.02628404E+01                   4
c10h17oDoGqE   2/8 ThERMc  10h  18o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    11
 3.85568156E+01 4.33198397E-02-1.50567686E-05 2.36275238E-09-1.38102514E-13    2
-8.72252450E+04-1.59817410E+02 2.10052295E+00 1.31773234E-01-1.00749739E-04    3
 4.17019882E-08-7.25598049E-12-7.46151760E+04 3.52784596E+01                   4
c10h17oEoFqC             c  10h  18o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.62567182E+01 0.11234336E+00-0.47342401E-04 0.87858343E-08-0.60207780E-12    2
```

```
 0.28933838E-07-0.33872255E-13-0.50427242E+05 0.49319466E+02                   4
c10h20rohCD 4/16/9 THERMc  10h  21o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.52860046E+02 0.13560716E-01-0.19652318E-05 0.15751621E-09-0.56206451E-14    2
-0.50503977E+05-0.24858864E+03-0.59233850E+00 0.12653472E+00-0.93318871E-04    3
 0.44129752E-07-0.12130841E-10-0.31655396E+05 0.41724075E+02                   4
c10h20qjohCD 4/15/9THERMc  10h  21o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.16675129E+02 0.76774716E-01-0.27434795E-04 0.45377662E-08-0.28695831E-12    2
-0.53213945E+05-0.38408905E+02-0.19030721E+01 0.14608902E+00-0.10599804E-03    3
 0.33820847E-07-0.17875002E-11-0.50125805E+05 0.50506203E+02                   4
c10h20rohDE 4/16/9 THERMc  10h  21o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.52860046E+02 0.13560716E-01-0.19652318E-05 0.15751621E-09-0.56206451E-14    2
-0.50503977E+05-0.24858864E+03-0.59233850E+00 0.12653472E+00-0.93318871E-04    3
 0.44129752E-07-0.12130841E-10-0.31655396E+05 0.41724075E+02                   4
c10h20qjohDE 4/15/9THERMc  10h  21o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.16675129E+02 0.76774716E-01-0.27434795E-04 0.45377662E-08-0.28695831E-12    2
-0.53213945E+05-0.38408905E+02-0.19030721E+01 0.14608902E+00-0.10599804E-03    3
 0.33820847E-07-0.17875002E-11-0.50125805E+05 0.50506203E+02                   4
c10h20rohEF 4/16/9 THERMc  10h  21o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.52860046E+02 0.13560716E-01-0.19652318E-05 0.15751621E-09-0.56206451E-14    2
-0.50503977E+05-0.24858864E+03-0.59233850E+00 0.12653472E+00-0.93318871E-04    3
 0.44129752E-07-0.12130841E-10-0.31655396E+05 0.41724075E+02                   4
c10h20qjohEF 4/15/9THERMc  10h  21o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.16675129E+02 0.76774716E-01-0.27434795E-04 0.45377662E-08-0.28695831E-12    2
-0.53213945E+05-0.38408905E+02-0.19030721E+01 0.14608902E+00-0.10599804E-03    3
 0.33820847E-07-0.17875002E-11-0.50125805E+05 0.50506203E+02                   4
c2h5cohco                c  4h   6o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14739259E+02 0.13225887E-01-0.38941639E-05 0.56251526E-09-0.32462870E-13    2
-0.41397336E+05-0.53247761E+02 0.18051472E+01 0.42755753E-01-0.25063433E-04    3
 0.45236979E-08 0.57545120E-12-0.37283613E+05 0.15680321E+02                   4
c2h5coco                 c  4h   5o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15105543E+02 0.98749883E-02-0.23287557E-05 0.28538863E-09-0.14688630E-13    2
-0.23719982E+05-0.56292492E+02 0.18359716E+01 0.38315888E-01-0.19234067E-04    3
 0.12637504E-09 0.18738962E-11-0.19373721E+05 0.14963073E+02                   4
ch3coch2hco              c  4h   6o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.11254543E+01 0.39765101E-01-0.16878952E-04 0.31484686E-08-0.21655221E-12    2
-0.40318285E+05 0.42259468E+02-0.60580101E-01 0.46090852E-01-0.28861905E-04    3
 0.67779320E-08 0.68161687E-12-0.41638715E+05 0.33134945E+02                   4
ch3coch2co               c  4h   5o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16903890E+01 0.30235900E-01-0.11208532E-04 0.19016195E-08-0.12235966E-12    2
-0.23242553E+05 0.29035389E+02 0.33443961E+00 0.44383127E-01-0.35499481E-04    3
 0.16137106E-07-0.28740189E-11-0.23871773E+05 0.32342957E+02                   4
choch2ch2cho             c  4h   6o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10402323E+02 0.20059148E-01-0.69339849E-05 0.11205451E-08-0.69735613E-13    2
-0.39731719E+05-0.22132637E+02 0.19870868E+01 0.47386240E-01-0.41948748E-04    3
 0.22063963E-07-0.49414132E-11-0.37569957E+05 0.20414827E+02                   4
chcoch2ch2co 7/11/7 ThERMc   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1373.000    21
 1.35372607E+01 1.35220919E-02-4.57439065E-06 7.05557672E-10-4.07673567E-14    2
-2.19470290E+04-3.84549802E+01 5.22317090E+00 2.99719445E-02-1.62395548E-05    3
 4.16970293E-09-3.91746676E-13-1.87077258E+04 7.34488150E+00                   4
c3h7cohco                c  5h   8o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16468891E+02 0.19568112E-01-0.60803804E-05 0.91144953E-09-0.53877381E-13    2
-0.44782672E+05-0.60479607E+02 0.16150942E+01 0.54419052E-01-0.31526542E-04    3
 0.52918128E-08 0.10052649E-11-0.40179207E+05 0.18274025E+02                   4
c3h7coco                 c  5h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17075876E+02 0.15713822E-01-0.41878484E-05 0.56234178E-09-0.30846687E-13    2
-0.27186080E+05-0.64803772E+02 0.16084892E+01 0.50249301E-01-0.26353942E-04    3
 0.15519785E-08 0.20711744E-11-0.22265547E+05 0.17733343E+02                   4
c2h5coch2hco   11/16/07 c   5h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.12940953E+02 0.69903918E-01-0.31803214E-04 0.62314123E-08-0.44409864E-12    2
-0.38527070E+05 0.11053633E+03-0.84370774E+00 0.63168347E-01-0.45684359E-04    3
 0.13530840E-07 0.60230298E-12-0.44663621E+05 0.37952915E+02                   4
```

```
c2h5coch2co    11/16/07 c   5h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.97643614E+01 0.59025787E-01-0.24843101E-04 0.46061848E-08-0.31543816E-12    2
-0.21479910E+05 0.95646568E+02-0.39542896E+00 0.61088029E-01-0.51419604E-04    3
 0.21982974E-07-0.26304282E-11-0.26902330E+05 0.36940765E+02                   4
ch3coc2h4hco             c   5h   8o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.90419042E+00 0.48337679E-01-0.20118665E-04 0.37012207E-08-0.25206985E-12    2
-0.41660785E+05 0.43492023E+02 0.20693679E+01 0.54399990E-01-0.36287605E-04    3
 0.10339596E-07 0.17453447E-12-0.44020766E+05 0.22654131E+02                   4
ch3coc2h4co              c   5h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19177376E+01 0.38844462E-01-0.14501396E-04 0.24715141E-08-0.15948743E-12    2
-0.24595562E+05 0.30215622E+02 0.25740378E+01 0.51932082E-01-0.41100266E-04    3
 0.17878603E-07-0.27374559E-11-0.26265559E+05 0.21402668E+02                   4
hcoc3h6hco               c   5h   8o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.24373136E+01 0.51202632E-01-0.21667551E-04 0.40336059E-08-0.27706578E-12    2
-0.37370984E+05 0.51938530E+02 0.23621762E+01 0.54721203E-01-0.36765450E-04    3
 0.97104857E-08 0.74680491E-12-0.40521121E+05 0.20666948E+02                   4
hcoc3h6co                c   5h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.51536059E+00 0.41369535E-01-0.15779357E-04 0.27307743E-08-0.17814541E-12    2
-0.20339604E+05 0.38679955E+02 0.27169209E+01 0.53290054E-01-0.44060904E-04    3
 0.19720455E-07-0.30373148E-11-0.22749828E+05 0.20743933E+02                   4
c4h9cohco                c   6h  10o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18230997E+02 0.25888149E-01-0.82845845E-05 0.12680983E-08-0.76040804E-13    2
-0.48184930E+05-0.67906448E+02 0.13289819E+01 0.66762194E-01-0.39658451E-04    3
 0.77628544E-08 0.81913171E-12-0.43064703E+05 0.21272709E+02                   4
c4h9coco                 c   6h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19022552E+02 0.21653682E-01-0.61446640E-05 0.86261071E-09-0.48725970E-13    2
-0.30651861E+05-0.73206749E+02 0.13761438E+01 0.62239017E-01-0.33665914E-04    3
 0.32257297E-08 0.21613798E-11-0.25157170E+05 0.20525379E+02                   4
c3h7coch2hco   11/16/07 c   6h  10o   2    G  300.000  5000.000 1000.000    31
-0.11191474E+02 0.75941749E-01-0.33618278E-04 0.64603078E-08-0.45396651E-12    2
-0.41875945E+05 0.10332356E+03-0.10716561E+01 0.75103901E-01-0.52827163E-04    3
 0.15004920E-07 0.77228187E-12-0.47555281E+05 0.40705853E+02                   4
c3h7coch2co    11/16/07 c   6h   9o   2    G  300.000  5000.000 1000.000    31
-0.79288030E+01 0.65123327E-01-0.26849919E-04 0.49059343E-08-0.33245008E-12    2
-0.24896879E+05 0.87857796E+02-0.74232560E+00 0.73849380E-01-0.60547038E-04    3
 0.25438153E-07-0.31613939E-11-0.29781277E+05 0.40201035E+02                   4
c2h5coc2h4hco            c   6h  10o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899969E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060305E+05 0.26899633E+02                   4
c2h5coc2h4co             c   6h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.93244343E+01 0.67222312E-01-0.27887543E-04 0.51179700E-08-0.34791446E-12    2
-0.22908547E+05 0.95663322E+02 0.18367063E+01 0.68703756E-01-0.57223951E-04    3
 0.23976128E-07-0.26011268E-11-0.29295502E+05 0.26028908E+02                   4
ch3coc3h6hco             c   6h  10o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79979819E+00 0.54688908E-01-0.22283117E-04 0.40390686E-08-0.27222297E-12    2
-0.45029750E+05 0.36420666E+02 0.19080460E+01 0.65878943E-01-0.42343370E-04    3
 0.10733933E-07 0.72611876E-12-0.46919648E+05 0.25124050E+02                   4
ch3coc3h6co              c   6h   9o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.35012920E+01 0.45491531E-01-0.16893529E-04 0.28698885E-08-0.18484502E-12    2
-0.27930250E+05 0.23778927E+02 0.24413955E+01 0.63199483E-01-0.46618847E-04    3
 0.17711248E-07-0.19793720E-11-0.29167326E+05 0.23756651E+02                   4
c5h11cohco               c   7h  12o   2    G  300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19808544E+02 0.32505091E-01-0.10620273E-04 0.16478627E-08-0.99640924E-13    2
-0.51512996E+05-0.74297371E+02 0.11027051E+01 0.78663722E-01-0.46658592E-04    3
 0.90292662E-08 0.10863246E-11-0.45956246E+05 0.24021563E+02                   4
c5h11coco                c   7h  11o   2    G  300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20718140E+02 0.28017355E-01-0.83104260E-05 0.12034383E-08-0.69387787E-13    2
-0.34018672E+05-0.80223793E+02 0.11081926E+01 0.74438207E-01-0.41396259E-04    3
 0.52330980E-08 0.21628554E-11-0.28044404E+05 0.23457716E+02                   4
c4h9coch2hco   11/16/07 c   7h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.94036551E+01 0.82001582E-01-0.35512909E-04 0.67193024E-08-0.46691893E-12    2
-0.45254449E+05 0.95854774E+02-0.13707602E+01 0.87533154E-01-0.61154518E-04    3
 0.17658323E-07 0.52635457E-12-0.50439336E+05 0.43760078E+02                   4
c4h9coch2co    11/16/07 c   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.62559252E+01 0.71541063E-01-0.29064269E-04 0.52574451E-08-0.35382664E-12    2
-0.28254691E+05 0.80957962E+02-0.79357970E+00 0.84560499E-01-0.64751395E-04    3
 0.23981560E-07-0.19548863E-11-0.32691863E+05 0.42208435E+02                   4
c3h7coc2h4co             c   7h  12o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.10871086E+02 0.84257521E-01-0.36654397E-04 0.69569905E-08-0.48450442E-12    2
-0.43244383E+05 0.10404272E+03 0.13054632E+01 0.81709594E-01-0.56189387E-04    3
 0.14539792E-07 0.16800742E-11-0.49963922E+05 0.29176781E+02                   4
c3h7coc2h4co             c   7h  11o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.77518487E+01 0.73803537E-01-0.30178713E-04 0.54840616E-08-0.37027925E-12    2
-0.26225336E+05 0.89327576E+02 0.15636251E+01 0.80936842E-01-0.65038796E-04    3
 0.26075456E-07-0.26360544E-11-0.32182129E+05 0.28977947E+02                   4
c7oAoE                   c   7h  12o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.10871086E+02 0.84257521E-01-0.36654397E-04 0.69569905E-08-0.48450442E-12    2
-0.43244391E+05 0.10404272E+03 0.13054632E+01 0.81709594E-01-0.56189387E-04    3
 0.14539792E-07 0.16800742E-11-0.49963926E+05 0.29176773E+02                   4
c7oyAoE                  c   7h  11o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.77518487E+01 0.73803537E-01-0.30178713E-04 0.54840616E-08-0.37027925E-12    2
-0.26225336E+05 0.89327576E+02 0.15636251E+01 0.80936842E-01-0.65038796E-04    3
 0.26075456E-07-0.26360544E-11-0.32182129E+05 0.28977947E+02                   4
c6h13cocho               c   8h  14o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21485601E+02 0.38983621E-01-0.12915806E-04 0.20246300E-08-0.12332850E-12    2
-0.54883762E+05-0.81255867E+02 0.80368114E+00 0.91093063E-01-0.54987253E-04    3
 0.11684440E-07 0.83978018E-12-0.48840324E+05 0.27075340E+02                   4
c6h13coco                c   8h  13o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22467527E+02 0.34334410E-01-0.10494272E-04 0.15539033E-08-0.91040334E-13    2
-0.37412430E+05-0.87551117E+02 0.11167953E+01 0.84740140E-01-0.44619410E-04    3
 0.27944003E-08 0.37184999E-11-0.30961547E+05 0.25225473E+02                   4
c8oAoC                   c   8h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.76532474E+01 0.88186562E-01-0.37524445E-04 0.70130346E-08-0.48309409E-12    2
-0.48627516E+05 0.88566010E+02-0.14613533E+01 0.98514296E-01-0.66000699E-04    3
 0.16836410E-07 0.15100886E-11-0.53345676E+05 0.45931557E+02                   4
c8oyAoC                  c   8h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.45436163E+01 0.77907883E-01-0.31262265E-04 0.56069438E-08-0.37511430E-12    2
-0.31631041E+05 0.73829605E+02-0.10666863E+01 0.96814275E-01-0.72669805E-04    3
 0.26239189E-07-0.20648528E-11-0.35578770E+05 0.45154221E+02                   4
c8oAoD                   c   8h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.91473370E+01 0.90475447E-01-0.38670787E-04 0.72492288E-08-0.50040527E-12    2
-0.46604883E+05 0.96909325E+02 0.92515320E+00 0.94688930E-01-0.65806562E-04    3
 0.18450802E-07 0.99884771E-12-0.52839102E+05 0.32576759E+02                   4
c8oyAoD                  c   8h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60215259E+01 0.80127493E-01-0.32340027E-04 0.58229084E-08-0.39058492E-12    2
-0.29608137E+05 0.82102364E+02 0.13401706E+01 0.92844799E-01-0.72121911E-04    3
 0.27493368E-07-0.24463001E-11-0.35074328E+05 0.31713640E+02                   4
c8oAoE                   c   8h  14o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.91473370E+01 0.90475447E-01-0.38670787E-04 0.72492288E-08-0.50040527E-12    2
-0.46604883E+05 0.96909325E+02 0.92515320E+00 0.94688930E-01-0.65806562E-04    3
 0.18450802E-07 0.99884771E-12-0.52839102E+05 0.32576759E+02                   4
c8oyAoE                  c   8h  13o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60215259E+01 0.80127493E-01-0.32340027E-04 0.58229084E-08-0.39058492E-12    2
-0.29608137E+05 0.82102364E+02 0.13401706E+01 0.92844799E-01-0.72121911E-04    3
 0.27493368E-07-0.24463001E-11-0.35074328E+05 0.31713640E+02                   4
c7h15cocho               c   9h  16o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23155094E+02 0.45477062E-01-0.15222285E-04 0.24040621E-08-0.14722373E-12    2
-0.58251656E+05-0.88173157E+02 0.68190461E+00 0.10229115E+00-0.60356600E-04    3
 0.11387066E-07 0.16369764E-11-0.51743332E+05 0.29378815E+02                   4
c7h15coco                c   9h  15o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24233280E+02 0.40633786E-01-0.12674992E-04 0.19038575E-08-0.11262376E-12    2
-0.40814055E+05-0.94991287E+02 0.68212771E+00 0.98115891E-01-0.55235818E-04    3
 0.77470652E-08 0.26542182E-11-0.33831184E+05 0.28853174E+02                   4
c9oAoC                   c   9h  16o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.58768668E+01 0.94361089E-01-0.39543469E-04 0.73097097E-08-0.49951671E-12    2
-0.52019414E+05 0.81111618E+02-0.16895115E+01 0.11043693E+00-0.73071729E-04    3
 0.18193893E-07 0.17378832E-11-0.56237133E+05 0.48687267E+02                   4
c9oyAoC                  c   9h  15o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.28858628E+01 0.84375001E-01-0.33509492E-04 0.59654708E-08-0.39695306E-12    2
-0.34988707E+05 0.66999374E+02-0.14097799E+01 0.10953296E+00-0.81649865E-04    3
 0.29498828E-07-0.25090095E-11-0.38457910E+05 0.48398739E+02                   4
c9oAoD                   c   9h  16o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.73688302E+01 0.96636087E-01-0.40675688E-04 0.75417566E-08-0.51645418E-12    2
-0.49995738E+05 0.89448219E+02 0.73609143E+00 0.10634527E+00-0.72250514E-04    3
 0.19195118E-07 0.14393408E-11-0.55734805E+05 0.35166233E+02                   4
c9oyAoD                  c   9h  15o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961660E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974582E+05 0.34120312E+02                   4
c9oAoE                   c   9h  16o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.73688302E+01 0.96636087E-01-0.40675688E-04 0.75417566E-08-0.51645418E-12    2
-0.49995738E+05 0.89448219E+02 0.73609143E+00 0.10634527E+00-0.72250514E-04    3
 0.19195118E-07 0.14393408E-11-0.55734805E+05 0.35166233E+02                   4
c9oyAoE                  c   9h  15o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961660E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974582E+05 0.34120312E+02                   4
c2h5coc3h6-1  14/04/09  c   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.19928465E+01 0.56852952E-01-0.22060156E-04 0.38633146E-08-0.25410208E-12    2
-0.92114756E+04 0.50608898E+02-0.10352753E+01 0.82059510E-01-0.76060234E-04    3
 0.38905025E-07-0.75072119E-11-0.12082103E+05 0.35920418E+02                   4
c2h5coc3h6o2-1 14/04/09 c   6h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.17303562E-01 0.61318409E-01-0.23928329E-04 0.42071560E-08-0.27748767E-12    2
-0.26859480E+05 0.45185028E+02 0.63390392E+00 0.84316202E-01-0.64012209E-04    3
 0.20561478E-07-0.22730355E-12-0.29712301E+05 0.32505867E+02                   4
c2h5coc3h6o2h-1 14/4/09 c   6h  12o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.24538543E+01 0.69068864E-01-0.28517543E-04 0.52170095E-08-0.35389608E-12    2
-0.43774516E+05 0.60120399E+02 0.17135122E+01 0.82158916E-01-0.57425153E-04    3
 0.15034768E-07 0.13820448E-11-0.47652664E+05 0.28990437E+02                   4
c2h5coc3h6o-1  14/04/09 c   6h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.25882854E+01 0.61611418E-01-0.24234871E-04 0.42846433E-08-0.28368407E-12    2
-0.25929021E+05 0.55830608E+02-0.98392731E+00 0.81776075E-01-0.63733642E-04    3
 0.23517160E-07-0.18506986E-11-0.28944176E+05 0.38313740E+02                   4
Fc6oC          11/20/07 c   6h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.19928465E+01 0.56852952E-01-0.22060156E-04 0.38633146E-08-0.25410208E-12    2
-0.92114756E+04 0.50608898E+02-0.10352753E+01 0.82059510E-01-0.76060234E-04    3
 0.38905025E-07-0.75072119E-11-0.12082103E+05 0.35920418E+02                   4
c6oCqjF        11/20/07 c   6h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.17303562E-01 0.61318409E-01-0.23928329E-04 0.42071560E-08-0.27748767E-12    2
-0.26859480E+05 0.45185028E+02 0.63390392E+00 0.84316202E-01-0.64012209E-04    3
 0.20561478E-07-0.22730355E-12-0.29712301E+05 0.32505867E+02                   4
Dc6oCqF        11/20/07 c   6h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.65709686E+00 0.60249776E-01-0.23397673E-04 0.41005794E-08-0.26988153E-12    2
-0.24306268E+05 0.43133324E+02 0.10258147E+01 0.89768246E-01-0.81939805E-04    3
 0.38916802E-07-0.64821607E-11-0.27381777E+05 0.30286562E+02                   4
c6oCqFqjD      11/20/07 c   6h  11o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.26609344E+01 0.65286502E-01-0.25646812E-04 0.45309143E-08-0.29987696E-12    2
-0.39109938E+05 0.39296135E+02 0.69323474E+00 0.10176343E+00-0.83807834E-04    3
 0.28916723E-07-0.11015376E-11-0.41929820E+05 0.37563919E+02                   4
nc3h7coc2h4p 2/22/96 trmc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.92391148e+01 2.51659147e-02-8.57508083e-06 1.32847255e-09-7.69774808e-14    2
-1.85404890e+04-7.00617026e+01 2.08958703e+00 6.24878115e-02-3.97257078e-05    3
 1.33752941e-08-1.92193795e-12-1.21992557e+04 2.32035207e+01                   4
nc3h7coc2h4o2  23/01/09 c   6h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27137476E+00 0.61813820E-01-0.24185589E-04 0.42612784E-08-0.28152272E-12    2
-0.26745207E+05 0.46796783E+02 0.38784835E+00 0.86001523E-01-0.67999958E-04    3
 0.24474442E-07-0.15869495E-11-0.29685695E+05 0.33551151E+02                   4
nc3h7coc2h4o2h 23/01/09 c   6h  12o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27132683E+01 0.69520004E-01-0.28754148E-04 0.52669251E-08-0.35760986E-12    2
-0.43673590E+05 0.61563953E+02 0.16487985E+01 0.82592793E-01-0.58421985E-04    3
 0.15976473E-07 0.10694108E-11-0.47645562E+05 0.29266394E+02                   4
nc3h7coc2h4o 23/01/09   c   6h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.26966052E+01 0.61800648E-01-0.24338944E-04 0.43078408E-08-0.28550282E-12    2
-0.25886318E+05 0.56434509E+02-0.85718077E+00 0.80896161E-01-0.61615043E-04    3
 0.21394984E-07-0.10963874E-11-0.28957740E+05 0.37777760E+02                   4
c3h7coc2h4qj   11/16/07 c   6h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.27137476E+00 0.61813820E-01-0.24185589E-04 0.42612784E-08-0.28152272E-12    2
-0.26745207E+05 0.46796783E+02 0.38784835E+00 0.86001523E-01-0.67999958E-04    3
 0.24474442E-07-0.15869495E-11-0.29685695E+05 0.33551151E+02                   4
c2h5chcoc2h4q  11/16/07 c   6h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.42567706E+00 0.60641065E-01-0.23592698E-04 0.41398209E-08-0.27268576E-12    2
-0.24215232E+05 0.44450573E+02 0.93443424E+00 0.90357177E-01-0.83266939E-04    3
 0.40158326E-07-0.68927971E-11-0.27371236E+05 0.30706070E+02                   4
c3h7coochch2q   11/16/07 c   6h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.38453087E+00 0.60715687E-01-0.23637132E-04 0.41504391E-08-0.27356521E-12    2
-0.24198471E+05 0.44685715E+02 0.91858512E+00 0.90490445E-01-0.83608677E-04    3
 0.40509040E-07-0.70185051E-11-0.27370053E+05 0.30774313E+02                   4
c2h5chqjcoc2h4q 11/16/7 c   6h  11o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.26609344E+01 0.65286502E-01-0.25646812E-04 0.45309143E-08-0.29987696E-12    2
-0.39109879E+05 0.39296928E+02 0.65595829E+00 0.10202046E+00-0.84421321E-04    3
 0.29525289E-07-0.13156865E-11-0.41925809E+05 0.37722607E+02                   4
c3h7cochqjch2q  11/16/7 c   6h  11o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.26609344E+01 0.65286502E-01-0.25646812E-04 0.45309143E-08-0.29987696E-12    2
-0.39109938E+05 0.38603127E+02 0.69323474E+00 0.10176343E+00-0.83807834E-04    3
 0.28916723E-07-0.11015376E-11-0.41929816E+05 0.36870907E+02                   4
nc4h9coc2h4p 2/22/96 trmc   7h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
-0.27709353E+00 0.63256085E-01-0.24308392E-04 0.42284425E-08-0.27681682E-12    2
-0.12596286E+05 0.43442142E+02-0.13162464E+01 0.94364487E-01-0.84094034E-04    3
 0.41271402E-07-0.76538663E-11-0.14968117E+05 0.38901386E+02                   4
nc4h9coc2h4o2  23/01/09 c   7h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.15442940E+01 0.68040177E-01-0.26338756E-04 0.46059276E-08-0.30268827E-12    2
-0.30168770E+05 0.39072868E+02 0.33634517E+00 0.96723363E-01-0.72253446E-04    3
 0.23091848E-07-0.41578110E-12-0.32596379E+05 0.35557541E+02                   4
nc4h9coc2h4o2h 23/01/09 c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.82995027E+00 0.75562038E-01-0.30756626E-04 0.55703624E-08-0.37517193E-12    2
-0.47112914E+05 0.53493481E+02 0.13843561E+01 0.94782956E-01-0.66182307E-04    3
 0.18075669E-07 0.10142453E-11-0.50533328E+05 0.32173725E+02                   4
nc4h9coc2h4o 23/01/09   c   7h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.85108739E+00 0.67970060E-01-0.26458378E-04 0.46447171E-08-0.30605328E-12    2
-0.29320070E+05 0.48549061E+02-0.12538546E+01 0.94012983E-01-0.71624308E-04    3
 0.25760444E-07-0.19605144E-11-0.31831494E+05 0.41246357E+02                   4
Ac7oC          11/19/07 c   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.27709353E+00 0.63256085E-01-0.24308392E-04 0.42284425E-08-0.27681682E-12    2
-0.12596286E+05 0.43442142E+02-0.13162464E+01 0.94364487E-01-0.84094034E-04    3
 0.41271402E-07-0.76538663E-11-0.14968117E+05 0.38901386E+02                   4
c7oCqjA        11/19/07 c   7h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15442940E+01 0.68040177E-01-0.26338756E-04 0.46059276E-08-0.30268827E-12    2
-0.30168770E+05 0.39072868E+02 0.33634517E+00 0.96723363E-01-0.72253446E-04    3
 0.23091848E-07-0.41578110E-12-0.32596379E+05 0.35557541E+02                   4
Dc7oCqA        11/19/07 c   7h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.22603157E+01 0.66837527E-01-0.25730542E-04 0.44810697E-08-0.29357606E-12    2
-0.27646125E+05 0.36615578E+02 0.69553852E+00 0.10241663E+00-0.90782822E-04    3
 0.42064428E-07-0.68936844E-11-0.30262621E+05 0.33493950E+02                   4
```

```
c7oCqAqjD      11/19/07 c   7h  13o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.43074183E+01 0.71792826E-01-0.27932670E-04 0.49008335E-08-0.32275259E-12    2
-0.42466027E+05 0.31825829E+02 0.56108463E+00 0.11302855E+00-0.89322195E-04    3
 0.28744292E-07-0.34065657E-12-0.44831668E+05 0.39220276E+02                   4
nc3h7coc3h6-1  14/4/09  c   7h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.27709353E+00 0.63256085E-01-0.24308392E-04 0.42284425E-08-0.27681682E-12    2
-0.12596286E+05 0.43442142E+02-0.13162464E+01 0.94364487E-01-0.84094034E-04    3
 0.41271402E-07-0.76538663E-11-0.14968117E+05 0.38901382E+02                   4
nc3h7coc3h6o2-1 14/4/09 c   7h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15442940E+01 0.68040177E-01-0.26338756E-04 0.46059276E-08-0.30268827E-12    2
-0.30168840E+05 0.39072212E+02 0.37372386E+00 0.96465625E-01-0.71638300E-04    3
 0.22481633E-07-0.20105247E-12-0.32600398E+05 0.35398567E+02                   4
nc3h7coc3h6o2h-1 14/4/9 c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.82995027E+00 0.75562038E-01-0.30756626E-04 0.55703624E-08-0.37517193E-12    2
-0.47112914E+05 0.53493481E+02 0.13843561E+01 0.94782956E-01-0.66182307E-04    3
 0.18075669E-07 0.10142453E-11-0.50533328E+05 0.32173725E+02                   4
nc3h7coc3h6o-1  14/4/09 c   7h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.85108739E+00 0.67970060E-01-0.26458378E-04 0.46447171E-08-0.30605328E-12    2
-0.29319891E+05 0.48548794E+02-0.13584634E+01 0.94736993E-01-0.73359792E-04    3
 0.27489104E-07-0.25710523E-11-0.31820275E+05 0.41688850E+02                   4
Ac7oD          11/20/07 c   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.27709353E+00 0.63256085E-01-0.24308392E-04 0.42284425E-08-0.27681682E-12    2
-0.12596286E+05 0.43442142E+02-0.13162464E+01 0.94364487E-01-0.84094034E-04    3
 0.41271402E-07-0.76538663E-11-0.14968117E+05 0.38901382E+02                   4
c7oDqjA        11/20/07 c   7h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.15442940E+01 0.68040177E-01-0.26338756E-04 0.46059276E-08-0.30268827E-12    2
-0.30168840E+05 0.39072212E+02 0.37372386E+00 0.96465625E-01-0.71638300E-04    3
 0.22481633E-07-0.20105247E-12-0.32600398E+05 0.35398567E+02                   4
Cc7oDqA        11/20/07 c   7h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.22500701E+01 0.66855945E-01-0.25741401E-04 0.44836419E-08-0.29378743E-12    2
-0.27642279E+05 0.36678741E+02 0.91601241E+00 0.10089627E+00-0.87142857E-04    3
 0.38440337E-07-0.56138618E-11-0.30286393E+05 0.32565609E+02                   4
c7oDqAqjC      11/20/07 c   7h  13o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.43207245E+01 0.71781620E-01-0.27947865E-04 0.49087507E-08-0.32366696E-12    2
-0.42470047E+05 0.31751045E+02 0.37356594E+00 0.11434632E+00-0.92532769E-04    3
 0.31995832E-07-0.15080582E-11-0.44811824E+05 0.40011875E+02                   4
nc6h13coc3h6-1  17/9/09 c  10h  19o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.47539911E+01 0.82678452E-01-0.31171461E-04 0.53491589E-08-0.34681809E-12    2
-0.22707973E+05 0.22577545E+02-0.19475780E+01 0.12979481E+00-0.10458541E-03    3
 0.44722682E-07-0.67872613E-11-0.23648559E+05 0.46946564E+02                   4
nc6h13coc3h6o2-1 17/9/09c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.66463242E+01 0.87344401E-01-0.33151500E-04 0.57189773E-08-0.37233961E-12    2
-0.40306828E+05 0.17811478E+02-0.48735911E+00 0.13350372E+00-0.96030701E-04    3
 0.29868836E-07-0.74278642E-12-0.41256441E+05 0.44412155E+02                   4
nhxcoc3h6o2h-1   17/9/09c  10h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43741097E+01 0.94577119E-01-0.37329104E-04 0.66182353E-08-0.43920499E-12    2
-0.57274234E+05 0.31710251E+02 0.10726475E+01 0.12802187E+00-0.81475468E-04    3
 0.16405615E-07 0.36697308E-11-0.59248320E+05 0.38854687E+02                   4
nc6h13coc3h6o-1  17/9/09c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.41304026E+01 0.87454513E-01-0.33331202E-04 0.57635172E-08-0.37568635E-12    2
-0.39409605E+05 0.27967888E+02-0.18962446E+01 0.12951648E+00-0.92278307E-04    3
 0.29356379E-07-0.11377110E-11-0.40510719E+05 0.49336288E+02                   4
nc6h13cooch2 4/9/09 thergc   8h  15o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.13095879E+02 0.51530220E-01-0.17955674E-04 0.29158329E-08-0.18195706E-12    2
-0.22079352E+05-0.31360634E+02-0.10810651E+01 0.99344060E-01-0.73200848E-04    3
 0.28423893E-07-0.41095551E-11-0.18985766E+05 0.38858177E+02                   4
nc6h13coch2o2 4/9/9 therc   8h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.10493491E+02 0.62341295E-01-0.22636101E-04 0.37836174E-08-0.24087587E-12    2
-0.35819863E+05-0.87785492E+01 0.10389701E+01 0.10517728E+00-0.76256765E-04    3
 0.25416805E-07-0.16783787E-11-0.35030578E+05 0.33653629E+02                   4
nc6h13coch2o2h 4/9/9therc   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
```

```
 0.84295816E+01 0.69077566E-01-0.26442598E-04 0.45870507E-08-0.29970747E-12    2
-0.52848141E+05 0.40251694E+01 0.22758703E+01 0.10193286E+00-0.67067893E-04    3
 0.17302149E-07 0.84399615E-12-0.52987828E+05 0.29466562E+02                   4
nc6h13coch2o 4/9/9 thergc   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.81315508E+01 0.62203679E-01-0.22721475E-04 0.38165258E-08-0.24394234E-12    2
-0.34981281E+05 0.51858521E+00-0.25794432E+00 0.10043867E+00-0.70775946E-04    3
 0.23268411E-07-0.15287035E-11-0.34297145E+05 0.38100636E+02                   4
nc5h11coch2 4/9/09 thergc   7h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.11565912E+02 0.44805121E-01-0.15541449E-04 0.25166160E-08-0.15678500E-12    2
-0.18766516E+05-0.25225800E+02-0.78872281E+00 0.86971402E-01-0.65039108E-04    3
 0.25971573E-07-0.39489718E-11-0.16101104E+05 0.35829269E+02                   4
nc5h11coch2o2 4/9/9 therc   7h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.87965269E+01 0.55888582E-01-0.20350768E-04 0.34093846E-08-0.21744713E-12    2
-0.32439494E+05-0.17062683E+01 0.14512132E+01 0.91956720E-01-0.66013206E-04    3
 0.20837234E-07-0.74675330E-12-0.32158537E+05 0.30119492E+02                   4
nc5h11coch2o2h 4/9/9therc   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.67901912E+01 0.62539011E-01-0.24117238E-04 0.42043031E-08-0.27558980E-12    2
-0.49493656E+05 0.10770271E+02 0.26199572E+01 0.89184307E-01-0.57956753E-04    3
 0.13851823E-07 0.13762410E-11-0.50108477E+05 0.26222891E+02                   4
nc5h11coch2o 4/9/9 thergc   7h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.64335599E+01 0.55745244E-01-0.20422225E-04 0.34369783E-08-0.21995626E-12    2
-0.31599939E+05 0.75994492E+01-0.17543760E+00 0.89507796E-01-0.66034008E-04    3
 0.24176153E-07-0.25360191E-11-0.31389871E+05 0.35962086E+02                   4
nc4h9coch2 2/22/96 thermc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1387.000    51
 1.98575871e+01 2.52406370e-02-8.72522623e-06 1.36422047e-09-7.95374883e-14    2
-2.20531958e+04-7.71140999e+01 6.57240675e-01 6.91820222e-02-4.79956182e-05    3
 1.78114857e-08-2.80456388e-12-1.51806661e+04 2.65180216e+01                   4
nc4h9coch2o2 23/01/09   c   6h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.70765643E+01 0.49467422E-01-0.18069997E-04 0.30336027E-08-0.19373747E-12    2
-0.29049797E+05 0.54964981E+01 0.16800222E+01 0.80003649E-01-0.58798578E-04    3
 0.19261471E-07-0.87040070E-12-0.29266809E+05 0.27362431E+02                   4
nc4h9coch2o2h 23/01/09  c   6h  12o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49432955E+01 0.56368947E-01-0.21999969E-04 0.38688066E-08-0.25522168E-12    2
-0.46057641E+05 0.18669518E+02 0.29456627E+01 0.76562606E-01-0.49144201E-04    3
 0.10688752E-07 0.18118817E-11-0.47227172E+05 0.23057047E+02                   4
nc4h9coch2o  23/01/09   c   6h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.47593827E+01 0.49248084E-01-0.18102966E-04 0.30531948E-08-0.19565201E-12    2
-0.28229197E+05 0.14544067E+02 0.20381446E+00 0.76519638E-01-0.56354638E-04    3
 0.20162277E-07-0.18044660E-11-0.28514357E+05 0.32566277E+02                   4
nc5h11coc3h6-1  14/4/9  c   9h  17o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.30363081E+01 0.76269872E-01-0.28914286E-04 0.49814086E-08-0.32388518E-12    2
-0.19320652E+05 0.29761848E+02-0.17976100E+01 0.11840548E+00-0.98765966E-04    3
 0.44578751E-07-0.74306030E-11-0.20748639E+05 0.44521168E+02                   4
nc5h11coc3h6o2-1 14/4/9 c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46585231E+01 0.81381120E-01-0.31097577E-04 0.53877969E-08-0.35171069E-12    2
-0.36813500E+05 0.26506081E+02-0.19009900E+00 0.12104988E+00-0.87539272E-04    3
 0.26935908E-07-0.35511096E-12-0.38371707E+05 0.41369411E+02                   4
npecoc3h6o2h-1      4/9 c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23627059E+01 0.88693760E-01-0.35346722E-04 0.63068311E-08-0.42028739E-12    2
-0.53776957E+05 0.40521729E+02 0.75899494E+00 0.11979280E+00-0.83101346E-04    3
 0.23541356E-07 0.50399875E-12-0.56298043E+05 0.38402130E+02                   4
nc5h11coc3h6o-1  14/4/9 c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.26204574E+01 0.80708377E-01-0.30922896E-04 0.53689337E-08-0.35107453E-12    2
-0.36105652E+05 0.33986694E+02-0.14023944E+01 0.11575917E+00-0.80825128E-04    3
 0.23654700E-07 0.16010857E-12-0.37647797E+05 0.45452847E+02                   4
ch3coc5h9-1     14/4/9 c   7h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.10120316E+02 0.44608474E-01-0.16482942E-04 0.27900673E-08-0.17923937E-12    2
-0.26480787E+05-0.17542809E+02 0.54319590E+00 0.73347867E-01-0.42336505E-04    3
 0.78475813E-08 0.14173481E-11-0.24239203E+05 0.30715996E+02                   4
c2h5coc5h9-1    14/4/9 c   8h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.98768568E+00 0.72651155E-01-0.29619196E-04 0.53722680E-08-0.36230735E-12    2
```

```
-0.24828543E+05 0.47204861E+02-0.21534809E+00 0.90278000E-01-0.58871810E-04    3
 0.14389625E-07 0.13839852E-11-0.27267029E+05 0.35426846E+02                   4
ch2coc5h9-1     14/4/9 c   7h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12798200E+02 0.37607454E-01-0.12782762E-04 0.20395223E-08-0.12571717E-12    2
-0.39647793E+04-0.31809212E+02-0.24265784E+00 0.79362623E-01-0.59240945E-04    3
 0.22834366E-07-0.31979820E-11-0.89970154E+03 0.33584213E+02                   4
ch3coc5h8-15    14/4/9 c   7h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12543714E+02 0.37481714E-01-0.12652797E-04 0.20086135E-08-0.12335819E-12    2
-0.68200312E+04-0.30952133E+02-0.17468783E+00 0.81123672E-01-0.67191577E-04    3
 0.32027643E-07-0.65410125E-11-0.39642434E+04 0.32128975E+02                   4
ch3coc5h8-13    14/4/9 c   7h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.11685796E+02 0.38428675E-01-0.13045591E-04 0.20811772E-08-0.12835632E-12    2
-0.10966742E+05-0.25643135E+02 0.84971964E+00 0.72163954E-01-0.48868886E-04    3
 0.16963947E-07-0.20996117E-11-0.83836494E+04 0.28918091E+02                   4
sc2h4coc5h9-1   14/4/9 c   8h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18777597E+01 0.64403608E-01-0.24834610E-04 0.43300354E-08-0.28390869E-12    2
-0.53298887E+04 0.31646553E+02 0.23790632E+00 0.89733906E-01-0.64872816E-04    3
 0.21083968E-07-0.74077452E-12-0.71062251E+04 0.32192642E+02                   4
c2h5coc5h8-15    14/4/9 c   8h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.21399291E+01 0.63860677E-01-0.24555016E-04 0.42739168E-08-0.27995423E-12    2
-0.53771641E+04 0.30068565E+02-0.81942040E+00 0.97296253E-01-0.81950042E-04    3
 0.36826346E-07-0.59657218E-11-0.70048813E+04 0.36343597E+02                   4
c2h5coc5h8-13    14/4/9 c   8h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.13281809E+01 0.64736195E-01-0.24912279E-04 0.43385882E-08-0.28430470E-12    2
-0.95447500E+04 0.35133892E+02 0.23215331E+00 0.88131994E-01-0.63118801E-04    3
 0.21245411E-07-0.13391435E-11-0.11426853E+05 0.33040543E+02                   4
Ac8oB          11/20/07 c   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13019993E+02 0.51662784E-01-0.18029459E-04 0.29325748E-08-0.18329408E-12    2
-0.22049264E+05-0.30937851E+02-0.97592682E+00 0.98611005E-01-0.71430644E-04    3
 0.26647946E-07-0.34779946E-11-0.18996963E+05 0.38413456E+02                   4
c8oBqjA        11/20/07 c   8h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.10417098E+02 0.62473711E-01-0.22708580E-04 0.37997863E-08-0.24214796E-12    2
-0.35789539E+05-0.83526840E+01 0.11709684E+01 0.10424709E+00-0.73988187E-04    3
 0.23121460E-07-0.85625718E-12-0.35044488E+05 0.33096714E+02                   4
Cc8oBqA        11/20/07 c   8h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.11084456E+02 0.61377130E-01-0.22174727E-04 0.36936287E-08-0.23458611E-12    2
-0.33251016E+05-0.10556702E+02 0.18107433E+01 0.10800309E+00-0.87867294E-04    3
 0.37450988E-07-0.56901623E-11-0.32740979E+05 0.29835604E+02                   4
c8oBqAqjC      11/20/07 c   8h  15o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.13064142E+02 0.66384465E-01-0.24349276E-04 0.40987422E-08-0.26220681E-12    2
-0.48035355E+05-0.14242722E+02 0.14106435E+01 0.12043736E+00-0.90743888E-04    3
 0.28416514E-07-0.63705990E-12-0.47281242E+05 0.37389004E+02                   4
nc5h11coc2h4p 2/22/96trmc   8h  15o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.12178297E+01 0.70042849E-01-0.26764796E-04 0.46391961E-08-0.30304920E-12    2
-0.15893626E+05 0.37505653E+02-0.15102980E+01 0.10605914E+00-0.90638830E-04    3
 0.42124377E-07-0.72543109E-11-0.17863342E+05 0.41514374E+02                   4
nc5h11coc2h4o2 23/01/09 c   8h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31401424E+01 0.74644431E-01-0.28685547E-04 0.49904623E-08-0.32675677E-12    2
-0.33505961E+05 0.32574547E+02 0.85516218E-02 0.10934611E+00-0.81028949E-04    3
 0.26172604E-07-0.80501193E-12-0.35477293E+05 0.38735687E+02                   4
nc5h11coc2h4o2h 23/01/09c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.83614087E+00 0.82002275E-01-0.32981116E-04 0.59228502E-08-0.39650764E-12    2
-0.50471973E+05 0.46620178E+02 0.12480025E+01 0.10608212E+00-0.71789218E-04    3
 0.18004227E-07 0.17371031E-11-0.53434789E+05 0.34538818E+02                   4
nc5h11coc2h4o 23/01/09  c   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67451662E+00 0.74695259E-01-0.28871642E-04 0.50442526E-08-0.33131879E-12    2
-0.32629000E+05 0.42443588E+02-0.15000561E+01 0.10605342E+00-0.78962214E-04    3
 0.27370671E-07-0.18180812E-11-0.34720902E+05 0.44081673E+02                   4
c5h11coc2h4qj  11/16/07 c   8h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.31401424E+01 0.74644431E-01-0.28685547E-04 0.49904623E-08-0.32675677E-12    2
-0.33505961E+05 0.32574547E+02 0.85516218E-02 0.10934611E+00-0.81028949E-04    3
```

```
 0.26172604E-07-0.80501193E-12-0.35477293E+05 0.38735687E+02                   4
c4h9chcoc2h4q  11/16/07 c   8h  15o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.38267305E+01 0.73495127E-01-0.28109305E-04 0.48731437E-08-0.31825505E-12    2
-0.30971662E+05 0.30290199E+02 0.56283855E+00 0.11368886E+00-0.96303324E-04    3
 0.41882405E-07-0.61236233E-11-0.33164543E+05 0.35854561E+02                   4
c4h9chqjcoc2h4q 11/2007 c   8h  15o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.58159952E+01 0.78545384E-01-0.30356010E-04 0.53015694E-08-0.34804562E-12    2
-0.45768270E+05 0.26507950E+02 0.12432060E+00 0.12639786E+00-0.99864548E-04    3
 0.33559555E-07-0.13331153E-11-0.47700805E+05 0.43553360E+02                   4
nc9h19coch2 17/9/09thergc  11h  21o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.18098814E+02 0.71042903E-01-0.24898556E-04 0.40584318E-08-0.25384355E-12    2
-0.32186500E+05-0.52088440E+02-0.15774717E+01 0.13384618E+00-0.91470174E-04    3
 0.29663282E-07-0.24623829E-11-0.27680816E+05 0.46330254E+02                   4
nc9h19coch2o2 17/9/9therc  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.15234638E+02 0.82281135E-01-0.29775734E-04 0.49626179E-08-0.31515917E-12    2
-0.45822180E+05-0.28041733E+02 0.46610308E+00 0.14017256E+00-0.95620795E-04    3
 0.27653023E-07-0.34870991E-12-0.43716898E+05 0.41451729E+02                   4
nc9h19coch2o2h 9/09 therc  11h  22o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.13061464E+02 0.89183122E-01-0.33661883E-04 0.57831793E-08-0.37536884E-12    2
-0.62801379E+05-0.14617874E+02 0.16218126E+01 0.13749172E+00-0.87786095E-04    3
 0.20890109E-07 0.16952121E-11-0.61665469E+05 0.37604671E+02                   4
nc9h19coch2o 17/9/9thergc  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.12841184E+02 0.82199603E-01-0.29892912E-04 0.50028754E-08-0.31882231E-12    2
-0.44970578E+05-0.18566879E+02-0.12325810E+01 0.13823795E+00-0.96912234E-04    3
 0.32293666E-07-0.26096673E-11-0.42940738E+05 0.47598335E+02                   4
nc7h15coch2 4/9/09 thergc   9h  17o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.14872713E+02 0.57854902E-01-0.20183796E-04 0.32797880E-08-0.20472697E-12    2
-0.25492543E+05-0.38880722E+02-0.11182301E+01 0.10997973E+00-0.77266712E-04    3
 0.26868804E-07-0.28816641E-11-0.21898242E+05 0.40803650E+02                   4
nc7h15coch2o2 4/9/9 therc   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.11961084E+02 0.69180779E-01-0.25117040E-04 0.41982711E-08-0.26728679E-12    2
-0.39109066E+05-0.14569466E+02 0.84187615E+00 0.11688019E+00-0.82786908E-04    3
 0.26218911E-07-0.12479049E-11-0.37925309E+05 0.36279770E+02                   4
nc7h15coch2o2h 4/9/9therc   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.99080772E+01 0.75885788E-01-0.28897963E-04 0.49948157E-08-0.32552468E-12    2
-0.56139234E+05-0.18210754E+01 0.19086102E+01 0.11480793E+00-0.76394666E-04    3
 0.20878485E-07 0.29800926E-12-0.55864230E+05 0.32813053E+02                   4
nc7h15coch2o 4/9/9 thergc   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.94459352E+01 0.69287643E-01-0.25307027E-04 0.42486463E-08-0.27136274E-12    2
-0.38208930E+05-0.44115295E+01-0.47909895E+00 0.11228338E+00-0.77577526E-04    3
 0.24266638E-07-0.11403404E-11-0.37188969E+05 0.40832279E+02                   4
Ac9oB          11/20/07 c   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14738609E+02 0.58089465E-01-0.20316151E-04 0.33101295E-08-0.20716565E-12    2
-0.25438445E+05-0.38131523E+02-0.12738410E+01 0.11104447E+00-0.79788413E-04    3
 0.29351588E-07-0.37491100E-11-0.21881383E+05 0.41464699E+02                   4
c9oBqjA        11/20/07 c   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.12087893E+02 0.68973690E-01-0.25023159E-04 0.41812034E-08-0.26618180E-12    2
-0.39159586E+05-0.15280083E+02 0.91406304E+00 0.11639324E+00-0.81656057E-04    3
 0.25133611E-07-0.88013331E-12-0.37933207E+05 0.35972260E+02                   4
Cc9oBqA        11/20/07 c   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.12727651E+02 0.67927808E-01-0.24519870E-04 0.40823926E-08-0.25922892E-12    2
-0.36609871E+05-0.17315048E+02 0.13838489E+01 0.12133180E+00-0.98374840E-04    3
 0.42293763E-07-0.67141245E-11-0.35611609E+05 0.33445251E+02                   4
c9oBqAqjC      11/20/07 c   9h  17o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.14547517E+02 0.73209301E-01-0.26841650E-04 0.45198649E-08-0.28937009E-12    2
-0.51330242E+05-0.20123779E+02 0.10209330E+01 0.13348329E+00-0.10052321E-03    3
 0.32489805E-07-0.13752807E-11-0.50155434E+05 0.40829502E+02                   4
nc6h13coc2h4p 2/22/96trmc   9h  17o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    51
 0.30363081E+01 0.76269872E-01-0.28914286E-04 0.49814086E-08-0.32388518E-12    2
-0.19320652E+05 0.29761848E+02-0.17976100E+01 0.11840548E+00-0.98765966E-04    3
 0.44578751E-07-0.74306030E-11-0.20748639E+05 0.44521168E+02                   4
```

```
nc6h13coc2h4o2 23/01/09 c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46585231E+01 0.81381120E-01-0.31097577E-04 0.53877969E-08-0.35171069E-12    2
-0.36813531E+05 0.26506470E+02-0.17503056E+00 0.12094752E-02-0.87298089E-04    3
 0.26699155E-07-0.27251172E-12-0.38373355E+05 0.41305740E+02                   4
nc6h13coc2h4o2h 23/01/09c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.23627059E+01 0.88693760E-01-0.35346722E-04 0.63068311E-08-0.42028739E-12    2
-0.53776957E+05 0.40521729E+02 0.75899494E+00 0.11979280E+00-0.83101346E-04    3
 0.23541356E-07 0.50399875E-12-0.56298043E+05 0.38402130E+02                   4
nc6h13coc2h4o 23/01/09  c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.26204574E+01 0.80708377E-01-0.30922896E-04 0.53689337E-08-0.35107453E-12    2
-0.36105680E+05 0.33987350E+02-0.13873260E+01 0.11565682E+00-0.80583937E-04    3
 0.23417947E-07 0.24270795E-12-0.37649445E+05 0.45389435E+02                   4
Ac9oC          11/20/07 c   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000   31
 0.30363081E+01 0.76269872E-01-0.28914286E-04 0.49814086E-08-0.32388518E-12    2
-0.19320652E+05 0.29761848E+02-0.17976100E+01 0.11840548E+00-0.98765966E-04    3
 0.44578751E-07-0.74306030E-11-0.20748639E+05 0.44521168E+02                   4
c9oCqjA        11/20/07 c   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000   31
 0.49838252E+01 0.80834121E-01-0.30827301E-04 0.53338138E-08-0.34787592E-12    2
-0.36942191E+05 0.24689209E+02-0.32536486E+00 0.12201972E+00-0.89956608E-04    3
 0.29444356E-07-0.12779821E-11-0.38357648E+05 0.41938526E+02                   4
Dc9oCqA        11/20/07 c   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000   31
 0.56185641E+01 0.79779498E-01-0.30308083E-04 0.52301115E-08-0.34049385E-12    2
-0.34387438E+05 0.22706779E+02 0.28413254E+00 0.12600292E+00-0.10440873E-03    3
 0.44366459E-07-0.63273766E-11-0.36051215E+05 0.38833908E+02                   4
c9oCqAqjD      11/20/07 c   9h  17o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000   31
 0.76531258E+01 0.84739745E-01-0.32496264E-04 0.56439200E-08-0.36904838E-12    2
-0.49201160E+05 0.18660461E+02 0.14553051E+00 0.13661097E+00-0.10288928E-03    3
 0.30947380E-07 0.27332908E-12-0.50619184E+05 0.45251297E+02                   4
cyc6h9           c   6h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12514480E+02 0.28764870E-01-0.11130330E-04 0.20307830E-08-0.13993690E-12    2
 0.82247910E+04-0.45839370E+02-0.68708450E+01 0.78867980E-01-0.50349830E-04    3
 0.47105440E-08 0.56820080E-11 0.13797400E+05 0.55227590E+02                   4
chxe1rD    2/ 4/ 8 ThERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1384.000   01
 1.54096184E+01 2.30452029E-02-7.87854402E-06 1.22358981E-09-7.10322953E-14    2
 1.42048918E+04-6.03452396E+01-5.12928429E+00 6.68717332E-02-4.14486927E-05    3
 1.18734846E-08-1.17420420E-12 2.16733689E+04 5.13032669E+01                   4
chd13            c   6h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13878210E+02 0.23487490E-01-0.87836690E-05 0.15790270E-08-0.10798250E-12    2
 0.63443000E+04-0.53115280E+02-0.51575390E+01 0.86214640E-01-0.90637690E-04    3
 0.51635260E-07-0.12001610E-10 0.11165820E+05 0.42866860E+02                   4
chd14      2/ 4/ 8 ThERMc   6h   8    0    0G   300.000  5000.000 1394.000   01
 1.50866863E+01 2.11483961E-02-7.29888357E-06 1.14020521E-09-6.64432988E-14    2
 5.02632710E+03-6.12881276E+01-5.34206341E+00 6.96903834E-02-5.16349220E-05    3
 1.96729153E-08-3.05521699E-12 1.20241900E+04 4.81120926E+01                   4
c6h7c            c   6h   70   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14208190E+02 0.21154810E-01-0.79957600E-05 0.14457800E-08-0.99207360E-13    2
 0.21922070E+05-0.54276400E+02-0.59255600E+01 0.91190910E-01-0.10607460E-03    3
 0.66699450E-07-0.17176370E-10 0.26832750E+05 0.46324050E+02                   4
cyc6h9o    5/ 2/ 6 thermc   6h   9o   10   0G   300.00   5000.00  1390.00     1
 1.98614061e+01 2.13541604e-02-7.29767436e-06 1.13391847e-09-6.58739166e-14    2
-4.24104162e+03-8.48415976e+01-7.09798187e+00 8.77373883e-02-7.00192618e-05    3
 2.81332888e-08-4.52307929e-12 4.68010482e+03 5.85742784e+01                   4
chxe1qjC   2/14/ 8      c   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000   11
 2.02412664E+01 2.44062656E-02-8.51546588E-06 1.33981860E-09-7.84607687E-14    2
-4.53664908E+03-8.30588709E+01-4.97843310E+00 8.69061420E-02-6.94485100E-05    3
 2.90255660E-08-4.97545531E-12 3.93256700E+03 5.12327992E+01                   4
Echxe1qC   2/14/ 8      c   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000   21
 2.16845782E+01 2.28146290E-02-7.98229630E-06 1.25847456E-09-7.38076566E-14    2
 6.13352517E+01-8.91559019E+01-4.80330040E+00 8.66707174E-02-6.73561472E-05    3
 2.65915059E-08-4.25031714E-12 9.03532731E+03 5.23560329E+01                   4
chxe1qCqjE 2/14/ 8 ThERMc   6h   9o   4    0G   300.000  5000.000 1391.000   31
 2.67841111E+01 2.34126599E-02-8.24642631E-06 1.30578725E-09-7.68105344E-14    2
-1.92745948E+04-1.13028494E+02-4.42240987E+00 1.04767020E-01-9.17912999E-05    3
 4.10628702E-08-7.37183362E-12-9.23280445E+03 5.16582128E+01                   4
chxe1oCqE  2/14/ 8 ThERMc   6h   8o   3    0G   300.000  5000.000 1390.000   21
 2.27312045E+01 2.20048170E-02-7.71926411E-06 1.21901851E-09-7.15719251E-14    2
-3.77408819E+04-9.25306974E+01-2.27954483E+00 8.31245980E-02-6.59297316E-05    3
 2.68882416E-08-4.46880424E-12-2.93028488E+04 4.08757757E+01                   4
chxe1oCojE 2/14/ 8 ThERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000   01
 1.88234574E+01 2.03160856E-02-6.97030001E-06 1.08492406E-09-6.30731182E-14    2
-1.77384207E+04-7.32948987E+01-3.34589245E+00 7.48640599E-02-5.87692067E-05    3
 2.36186159E-08-3.83766925E-12-1.03608202E+04 4.47149945E+01                   4
Fc6e3oAoE  2/14/ 8 ThERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000   31
 2.03602595E+01 1.83062673E-02-6.39872038E-06 1.00804454E-09-5.90855319E-14    2
-1.88022042E+04-7.45885509E+01 1.36426217E-01 6.83827541E-02-5.49313391E-05    3
 2.28341312E-08-3.87096366E-12-1.20341312E+04 3.30697382E+01                   4
Dc6e5oAoC  2/14/ 8 ThERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000   31
 2.02349508E+01 1.83345274E-02-6.39116571E-06 1.00506355E-09-5.88390878E-14    2
-1.49055865E+04-7.32371055E+01-8.32090796E-01 7.14015849E-02-5.86661793E-05    3
 2.48257388E-08-4.25681473E-12-7.96504791E+03 3.85567398E+01                   4
Fc6e5oA                 c   6h   9o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.97264261E+01 0.32164462E-01-0.10807038E-04 0.17105696E-08-0.10487566E-12    2
 0.10069441E+05-0.15002022E+02 0.78861153E+00 0.65266170E-01-0.52872289E-04    3
 0.23924105E-07-0.44274398E-11 0.11789281E+05 0.28345263E+02                   4
Fc6e2oA    5/10/ 6 thermc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000   41
 1.92420866e+01 2.09983928e-02-7.24163118e-06 1.13057295e-09-6.58504427e-14    2
-3.53780234e+03-7.12245223e+01-2.92322799e-01 6.90415413e-02-5.35435655e-05    3
 2.18712016e-08-3.67928326e-12 3.04642201e+03 3.29022640e+01                   4
Fc6h9-13   2/14/ 8 ThERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1398.000   21
 1.66526333E+01 2.07313229E-02-6.98155215E-06 1.07262447E-09-6.17783332E-14    2
 2.34571371E+04-5.94027644E+01-1.95074776E+00 6.99993459E-02-5.83590460E-05    3
 2.58219203E-08-4.63869654E-12 2.93664141E+04 3.84973850E+01                   4
hex135     11/ 5/ 3 thermc   6h   8    0    0G   300.000  5000.000 1398.000   21
 1.71119166e+01 1.84563339e-02-6.33854713e-06 9.86634342e-10-5.73412967e-14    2
 1.19848783e+04-6.72177638e+01-3.07637680e+00 7.60206382e-02-7.12770299e-05    3
 3.45856886e-08-6.64734786e-12 1.80525340e+04 3.76776224e+01                   4
ac3h4hco1  4/24/ 6 thermc   4h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1385.000   21
 1.31411233e+01 1.20974544e-02-4.25024176e-06 6.71876889e-10-3.94756754e-14    2
 1.44875725e+04-4.25915316e+01 5.84137389e-01 4.10586368e-02-2.99210110e-05    3
 1.11323029e-08-1.69792013e-12 1.89033496e+04 2.50108321e+01                   4
sc3h5co   11/15/95 thermc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000   21
 1.25514754e+01 1.22521948e-02-4.22382101e-06 6.59184896e-10-3.83818826e-14    2
-4.25349795e+03-4.02864145e+01 1.74191343e+00 3.97229536e-02-3.20061901e-05    3
 1.38227925e-08-2.46272017e-12-6.64428100e+02 1.70762023e+01                   4
Ac6h9-15   1/16/ 8 ThERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1395.000   31
 1.66031467E+01 2.06005407E-02-6.99190236E-06 1.08000014E-09-6.24404452E-14    2
 3.18542406E+04-5.87443028E+01-7.86658540E-01 6.32244667E-02-4.77129797E-05    3
 1.90751051E-08-3.14602136E-12 3.77090895E+04 3.39665164E+01                   4
CPD                     c   5h   6    0    0G   200.000  6000.00  1000.00     1
 0.99757848E+01 0.18905543E-01-0.68411461E-05 0.11099340E-08-0.66680236E-13    2
 0.11081693E+05-0.32209454E+02 0.86108957E+00 0.14804031E-01 0.72108895E-04    3
-0.11338055E-06 0.48689972E-10 0.14801755E+05 0.21353453E+02                   4
c5h5                    c   5h   5    0    0G   200.000  6000.00  1000.00     1
 0.10844072E+02 0.15392831E-01-0.55630422E-05 0.90189440E-09-0.54156619E-13    2
 0.26950886E+05-0.35254983E+02-0.95902849E+00 0.31396777E-01 0.26724050E-04    3
-0.68942183E-07 0.33301983E-10 0.30779441E+05 0.29072780E+02                   4
c5h4oh                  c   5h   5o   10   0G   200.000  6000.000  1000.00     1
 0.12464140E+02 0.16962420E-01-0.67059790E-05 0.12379980E-08-0.85931980E-13    2
 0.58349600E+03-0.41246490E+02-0.44756070E+01 0.70380500E-01-0.70966800E-04    3
 0.35607160E-07-0.66726040E-11 0.49595350E+04 0.44671790E+02                   4
c5h5o  Burcat     D 9/97c   5h   5o   1    0G   300.000  3000.000 1000.      1
 0.85405312E+01 0.22989510E-01-0.95437563E-05 0.17061612E-08-0.97459360E-13    2
```

```
 0.22263699E+05-0.20818825E+02-0.30777600E+01 0.52581679E-01-0.28856513E-04    3
-0.33885479E-08 0.63361399E-11 0.25510455E+05 0.39591522E+02 0.26570048E+05    4
c5h4o CY CPD-ONE  T 8/99c   5h   4o   1    0G   200.000  6000.000 1000.      1
 1.00806824E+01 1.61143465E-02-5.83314509E-06 9.46759320E-10-5.68972206E-14    2
 1.94364771E+03-2.94521623E+01 2.64576497E-01 3.34873827E-02 1.67738470E-06    3
-2.96207455E-08 1.54431476E-11 5.11159287E+03 2.35409513E+01 6.64245999E+03    4
cyc5h7                  c   5h   70   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10970790E+02 0.20687750E-01-0.79109650E-05 0.14348090E-08-0.98536910E-13    2
 0.20980600E+05-0.45658640E+02-0.13758240E+01 0.50951500E-01-0.27917360E-04    3
-0.20433550E-08 0.54688850E-11 0.24620190E+05 0.19135720E+02                   4
cyc5h8                  c   5h   80   00   0G   200.000  5000.000 1000.00     1
 0.77244792E+01 0.28322316E-01-0.11545236E-04 0.21540815E-08-0.15054178E-12    2
-0.78261573E+03-0.19769698E+02 0.26898140E+01 0.20954550E-02 0.11303687E-03    3
-0.15408070E-06 0.62763658E-10 0.23139663E+04 0.15294056E+02 0.39328836E+04    4
hex1245                 c   6h   6n   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13680730E+02 0.17633680E-01-0.64842380E-05 0.11584110E-08-0.79005510E-13    2
 0.41745620E+05-0.45718590E+02-0.23343600E+01 0.75090900E-01-0.90310510E-04    3
 0.59606520E-07-0.16142980E-10 0.45574960E+05 0.33898930E+02                   4
c6h615                  c   6h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11846640E+02 0.18049090E-01-0.54846110E-05 0.91594140E-09-0.60502440E-13    2
 0.44855800E+05-0.33325490E+02-0.36401770E-01 0.63911870E-01-0.78346460E-04    3
 0.56228300E-07-0.16490750E-10 0.47552700E+05 0.24997930E+02                   4
mc6h6                   c   6h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15515180E+02 0.16867690E-01-0.63937470E-05 0.11632720E-08-0.80233420E-13    2
 0.33817290E+05-0.60215590E+02-0.14330940E+02 0.14341690E+00-0.22435460E-03    3
 0.17716070E-06-0.54820030E-10 0.39991000E+05 0.83404450E+02                   4
fulvene                 c   6h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15787670E+02 0.16826830E-01-0.66372550E-05 0.12271550E-08-0.85353240E-13    2
 0.20113410E+05-0.61938640E+02-0.12269980E+02 0.12863210E+00-0.18798700E-03    3
 0.14034520E-06-0.41601280E-10 0.26242020E+05 0.74752650E+02                   4
che24one   7/12/ 7 THERMc   6h   6o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000   01
 1.85598210E+01 1.60420550E-02-5.62359046E-06 8.87632423E-10-5.20966489E-14    2
-1.50094842E+04-8.92286978E+01-3.30465491E+00 7.60446090E-02-7.07168412E-05    3
 3.34556493E-08-6.27781956E-12-8.24470996E+03 2.51406707E+01                   4
c6h6                    c   6h   60   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12910740E+02 0.01723296E+00-0.05024210E-04 0.05893497E-08-0.01947521E-12    2
 0.03664511E+05-0.05002699E+03-0.03138012E+02 0.04723103E+00-0.02962207E-04    3
-0.03262819E-06 0.01718691E-09 0.08890031E+05 0.03657573E+03                   4
c6h5                    c   6h   50   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15775887E+02 0.09651109E-01-0.09429416E-05-0.05469111E-08 0.10265216E-12    2
 0.03302698E+06-0.06176280E+03 0.11435567E+00 0.03627324E+00 0.11582856E-05    3
-0.02196964E-06 0.08463556E-10 0.03836054E+06 0.02380117E+03                   4
c6h5o                   c   6h   5o   10   0G   300.00   4000.00  1000.00     1
 0.01822638E+03 0.10039851E-01-0.09915668E-05-0.05672804E-08 0.10683716E-12    2
-0.02620846E+05-0.07361390E+03 0.11074965E+01 0.03956945E+00 0.08497295E-05    3
-0.02436311E-06 0.09650659E-10 0.03159672E+05 0.01973496E+03                   4
c6h5oh                  c   6h   6o   10   0G   300.00   4000.00  1000.00     1
 0.01821632E+03 0.11424269E-01-0.10966843E-05-0.06427442E-08 0.11988930E-12    2
-0.02053664E+06-0.07304233E+03 0.13914556E+01 0.03931957E+00 0.01777096E-04    3
-0.02277673E-06 0.08309659E-10-0.14721809E+05 0.01917813E+03                   4
c6h5o2 peroxy rad T03/06c  6.h  5.o  2.   0.G   200.000  6000.000 1000.     1
 1.53210095E+01 1.90635836E-02-6.90890063E-06 1.12266384E-09-6.75533163E-14    2
 1.01192586E+04-5.54641890E+01 6.21315217E-01 3.87686270E-02 2.99476833E-05    3
-7.77124708E-08 3.69056482E-11 1.49950465E+04 2.49794441E+01 1.70318713E+04    4
c6h4o2                  c   6h   4o   2    G       300      5000    1000      1
 0.11730840E+02 0.23614995E-01-0.10234576E-04 0.19532174E-08-0.12746022E-12    2
-0.21085770E+05-0.36300453E+02-0.95193005E+00 0.57842445E-01-0.38214439E-04    3
 0.46312656E-08 0.36296651E-11-0.17611047E+05 0.29239513E+02                   4
c6h3o2    HR BLYP-THERM c   6h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1400.000   01
 1.71770711E+01 1.17702612E-02-4.07415925E-06 6.38000145E-10-3.72505911E-14    2
 6.28011094E+03-6.58310086E+01-4.54411937E-02 5.63211380E-02-4.85334628E-05    3
```

```
 2.08639278E-08-3.55356225E-12 1.17545446E+04 2.50087628E+01                   4
c6h3o3     HR AM1 7/99  c   6h   3o   3    0G   300.000  5000.000 1394.000   01
 1.79137074E+01 1.39111341E-02-4.85997910E-06 7.65512134E-10-4.48691125E-14    2
-2.90419372E+04-6.62905654E+01 2.32755667E-01 5.78357880E-02-4.70375303E-05    3
 1.93299321E-08-3.19029643E-12-2.32022530E+04 2.76743751E+01                   4
c6h5o2h hydroper  T03/06c  6.h  6.o  2.   0.G   200.000  6000.000 1000.     1
 1.61396041E+01 2.08447848E-02-7.64070773E-06 1.24667046E-09-7.51132000E-14    2
-7.68952573E+03-5.95754960E+01 2.63159057E-01 4.23800271E-02 3.05412431E-05    3
-8.13196326E-08 3.86504418E-11-2.41155401E+03 2.73095957E+01-3.22058666E+02    4
c5h4      Alzueta       c   5h   4o   0    0G   300.000  5000.000 1402.000   01
 1.18628283E+01 1.08224559E-02-3.66068163E-06 5.63992229E-10-3.25439187E-14    2
 5.07812124E+04-3.73761707E+01 1.37368363E+00 3.97540360E-02-3.50715495E-05    3
 1.62273434E-08-3.00803585E-12 5.40010402E+04 1.74189357E+01                   4
c5h3      Kee           c   5h   3o   0    0G   300.000  5000.000 1402.000   01
 1.18709753E+01 8.29197467E-03-2.79466175E-06 4.29640356E-10-2.47579827E-14    2
 6.33234078E+04-3.64946037E+01 3.47139981E+00 3.05348313E-02-2.57689068E-05    3
 1.13143742E-08-1.99768735E-12 5.69670699E+04 7.66749172E+00                   4
toluen                  c   7h   80   00   0G   200.000  6000.00  1000.00     1
 0.12940034E+02 0.26691287E-01-0.96838505E-05 0.15738629E-08-0.94663601E-13    2
-0.69764908E+03-0.46728785E+02 0.16152663E+01 0.21099438E-01 0.85366018E-04    3
-0.13261066E-06 0.55956604E-10 0.40756300E+04 0.20282210E+02                   4
phch2                   c   7h   70   00   0G   200.000  6000.000 1000.0     1
 0.14043980E+02 0.23493873E-01-0.85375367E-05 0.13890841E-08-0.83614420E-13    2
 0.18564203E+05-0.51665589E+02 0.48111540E+00 0.38512832E-01 0.32861492E-04    3
-0.76972721E-07 0.35423068E-10 0.23307027E+05 0.23548820E+02                   4
phch2oh                 c   7h   8o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12770360E+02 0.30202020E-01-0.11447800E-04 0.20657750E-08-0.14142150E-12    2
-0.18661090E+05-0.40750220E+02-0.18199510E+01 0.59780950E-01-0.15944840E-04    3
-0.22394370E-07 0.13827140E-10-0.14039900E+05 0.37366900E+02                   4
phch2o                  c   7h   7o   10   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.11786960E+02 0.28687710E-01-0.98102230E-05 0.15723720E-08-0.97249460E-13    2
 0.76002110E+04-0.37226230E+02-0.70223900E+01 0.81629680E-01-0.61132220E-04    3
 0.20734560E-07-0.20847660E-11 0.12652870E+05 0.59532670E+02                   4
phhco                   c   7h   6o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12477340E+02 0.26156340E-01-0.10355870E-04 0.19086880E-08-0.13222350E-12    2
-0.10699560E+05-0.39903100E+02 0.18416540E+01 0.31811100E-01 0.37371600E-04    3
-0.71742300E-07 0.30772230E-10-0.65685440E+04 0.20871370E+02                   4
phco                    c   7h   5o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13055590E+02 0.22893250E-01-0.91611550E-05 0.16982380E-08-0.11804720E-12    2
 0.68496380E+04-0.41412370E+02 0.20476370E+01 0.32981980E-01 0.27311090E-04    3
-0.60962890E-07 0.26990060E-10 0.10899480E+05 0.20413040E+02                   4
hoc6h4ch3 avg cresol    c   7h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1400.000   21
 1.97311724e+01 2.12245074e-02-7.27602659e-06 1.13158989e-09-6.57395287e-14    2
-2.50451776e+04-8.18783394e+01-4.17663565e+00 8.29479164e-02-6.92618926e-05    3
 2.97047387e-08-5.12027914e-12-1.73715284e+04 4.43681107e+01                   4
oc6h4ch3  avg cresol    c   7h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000   11
 2.00333477e+01 1.83142467e-02-6.17265091e-06 9.50353551e-10-5.48634044e-14    2
-7.76864165e+03-8.60606102e+01-3.82920147e+00 7.73376217e-02-6.15929083e-05    3
 2.43728641e-08-3.80779615e-12 2.89377185e+01 4.06647799e+01                   4
phc2h5                  c   8h  100   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
  0.3878978E+01  0.5810059E-01 -0.3196380E-04  0.8448993E-08 -0.8694825E-12    2
 -0.5024922E+03  0.3823936E+01 -0.7266845E+01  0.1003089E+00 -0.9651715E-04    3
  0.5565908E-07 -0.1453370E-10  0.1987290E+04  0.5856430E+02                   4
Aphc2h4                 c   8h   90   00   0G   300.0    3000.0   1000.0      1
 0.17812740E+02 0.24252330E-01-0.73258030E-05 0.10781160E-08-0.63032930E-13    2
 0.19489380E+05-0.69123150E+02-0.54440620E+01 0.90239870E-01-0.78481590E-04    3
 0.37195140E-07-0.77518990E-11 0.25979520E+05 0.51002700E+02                   4
Bphc2h4                 c   8h   90   00   0G   300.0    3000.0   1000.0      1
 0.16311760E+02 0.26468430E-01-0.82500720E-05 0.12379150E-08-0.73142840E-13    2
 0.12434840E+05-0.61654800E+02-0.31388300E+01 0.73564250E-01-0.45062580E-04    3
 0.99457900E-08 0.39087490E-12 0.18338590E+05 0.40996950E+02                   4
```

```
styren                c   8h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14571320E+02 0.28601890E-01-0.10945920E-04 0.19866680E-08-0.13651030E-12    2
 0.10602530E+05-0.53346050E+02-0.47260910E+01 0.81145100E-01-0.58700960E-04    3
 0.14330870E-07 0.20285270E-11 0.16027630E+05 0.46634070E+02                   4
ASTYRYL               c   8h   7    0    0G   300.000  5000.000  1000.00      1
 0.16332950E+02 0.21419530E-01-0.65453240E-05 0.96915450E-09-0.56787960E-13    2
 0.39189790E+05-0.61551090E+02-0.36413490E+01 0.76848510E-01-0.62073960E-04    3
 0.25027450E-07-0.40434900E-11 0.44741910E+05 0.41739090E+02                   4
BSTYRYL               c   8h   7    0    0G   300.000  5000.000  1000.00      1
 0.14470230E+02 0.24105550E-01-0.77006060E-05 0.11776170E-08-0.70589850E-13    2
 0.34523810E+05-0.52091260E+02-0.18113050E+01 0.60426670E-01-0.27360430E-04    3
-0.41005130E-08 0.48287310E-11 0.39537740E+05 0.34420980E+02                   4
phc2h                 c   8h   60   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
  0.6441450E+01  0.4174141E-01 -0.2277228E-04  0.5894608E-08 -0.5895331E-12    2
  0.3527225E+05 -0.9471260E+01  0.1594150E+01  0.3139700E-01  0.6454891E-04    3
 -0.1252211E-06  0.5840699E-10  0.3716431E+05  0.1965262E+02                   4
c6h4c2h3          mar94 c   8h   7    0    0G   300.000  5000.    1394.       1
 1.74540862e 01 2.22040686e-02-9.33350484e-06 1.73528698e-09-1.13685613e-13    2
 3.87604904e 04-6.90454166e 01-5.18004315e 00 8.45709724e-02-7.57339260e-05    3
 3.38554022e-08-6.01465106e-12 4.55621698e 04 4.89682087e 01                   4
phch2hco  10/11/ 6 THERMc   8h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    21
 2.07189090E+01 2.34657288E-02-8.16859744E-06 1.28349619E-09-7.50981560E-14    2
-1.59748937E+04-8.38562538E+01-4.63817169E+00 8.37851572E-02-6.32386011E-05    3
 2.42587771E-08-3.76921290E-12-7.30919223E+03 5.18907332E+01                   4
phch2co    3/13/ 7 THERMc   8h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    21
 2.03082558E+01 2.13259410E-02-7.44358584E-06 1.17168778E-09-6.86428145E-14    2
 2.98500182E+03-7.99822433E+01-3.86936154E+00 7.90084288E-02-6.02144431E-05    3
 2.32059973E-08-3.60981055E-12 1.12198943E+04 4.93727805E+01                   4
phcoch2    7/ 5/99 ThERMc   8h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 2.06377587E+01 2.09842204E-02-7.31094395E-06 1.14935927E-09-6.72742545E-14    2
 3.46513492E+04-8.22574610E+01-2.89631990E+00 7.81864943E-02-6.10228928E-05    3
 2.43055421E-08-3.92233529E-12 4.25768671E+04 4.33055092E+01                   4
c6h5cco               c   8h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    1
 2.05717606e 01 1.65626187e-02-5.73631528e-06 8.98556853e-10-5.24719633e-14    2
 1.85523144e 04-7.88307218e 01 2.46903285e 00 5.68111793e-02-3.84432919e-05    3
 1.22781652e-08-1.44841401e-12 2.49411038e 04 1.89465318e 01                   4
pbz                   c   9h  120   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.19564560E+02  0.3371875E-01-0.11279970E-04 0.17806490E-08-0.10900860E-12    2
-0.86688460E+04 -0.7905852E+02-0.42383000E+01 0.90064150E-01-0.53314080E-04    3
 0.98838910E-08  0.1259661E-11-0.13268630E+04 0.46994210E+02                   4
pbzjA                 c   9h  110   00   0G   300.0    3000.0   1000.0       1
 0.21741480E+02 0.26909920E-01-0.79001150E-05 0.11369460E-08-0.65350950E-13    2
 0.15090430E+05-0.88689430E+02-0.51094210E+01 0.99100460E-01-0.81408620E-04    3
 0.36663080E-07-0.74230540E-11 0.22938900E+05 0.51351110E+02                   4
pbzjB                 c   9h  110   00   0G   300.0    3000.0   1000.0       1
 0.21129850E+02 0.27425010E-01-0.80787270E-05 0.11662760E-08-0.67219100E-13    2
 0.14768510E+05-0.85102500E+02-0.42891350E+01 0.94219390E-01-0.73481920E-04    3
 0.30863700E-07-0.57239250E-11 0.22298360E+05 0.47907890E+02                   4
pbzjC                 c   9h  110   00   0G   300.0    3000.0   1000.0       1
 0.20351020E+02 0.28741720E-01-0.86354620E-05 0.12621560E-08-0.73240880E-13    2
 0.80655060E+04-0.81773010E+02-0.37883710E+01 0.89749920E-01-0.64624140E-04    3
 0.24373790E-07-0.40718430E-11 0.15385500E+05 0.45257910E+02                   4
BPHPROPY              c   9h  110   00   0G   300.0    3000.0   1000.0       1
 0.18773470E+02 0.32017490E-01-0.10167760E-04 0.15489960E-08-0.92642370E-13    2
 0.14424040E+05-0.72622580E+02-0.61953190E+01 0.10511650E+00-0.89499430E-04    3
 0.40374020E-07-0.77179490E-11 0.21106050E+05 0.55387230E+02                   4
phc3h5-1   9/14/ 6 THERMc   9h  10    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 2.16587276E+01 2.75881451E-02-9.55076467E-06 1.49500893E-09-8.72399867E-14    2
 5.19915200E+03-9.05488599E+01-6.24410147E+00 9.58105961E-02-7.44144657E-05    3
 2.99733017E-08-4.93273232E-12 1.45952864E+04 5.82460572E+01                   4
phc3h5-2   9/14/ 6 THERMc   9h  10    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 2.19853383E+01 2.70638184E-02-9.31538265E-06 1.45259764E-09-8.45413132E-14    2
 2.69366707E+03-9.24338477E+01-4.35832771E+00 9.11717963E-02-6.97871645E-05    3
 2.77223371E-08-4.50000291E-12 1.15805419E+04 4.81294035E+01                   4
phc3h4     9/14/ 6 THERMc   9h   9    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 2.27552458E+01 2.43969901E-02-8.51385950E-06 1.33981649E-09-7.84733524E-14    2
 2.07012023E+04-9.74493675E+01-4.95799544E+00 9.40497566E-02-7.70155559E-05    3
 3.25278599E-08-5.57386852E-12 2.98543817E+04 4.96805752E+01                   4
phc3h3     9/ 8/ 6 THERMc   9h   8    0    0G   300.000  5000.000 1382.000    11
 2.63873378E+01 1.98410659E-02-7.09387681E-06 1.13452913E-09-6.72002176E-14    2
-3.77010981E+03-1.05729417E+02-2.73892818E+00 9.07206503E-02-7.40198477E-05    3
 3.03079033E-08-5.00421779E-12 6.05215549E+03 4.96816177E+01                   4
phc2h4hco  6/25/99 ThERMc   9h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 2.45201777E+01 2.65966062E-02-9.06999913E-06 1.40649173E-09-8.15706632E-14    2
-2.06440651E+04-1.03260879E+02-3.51452942E+00 9.44753458E-02-7.23466221E-05    3
 2.84149855E-08-4.52662508E-12-1.11972167E+04 4.63750693E+01                   4
phc2h4co   6/30/99      c   9h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 2.41401504E+01 2.44085832E-02-8.32461450E-06 1.29120181E-09-7.49030128E-14    2
-1.69689524E+03-9.95597353E+01-2.74324766E+00 8.96773901E-02-6.92714443E-05    3
 2.73162150E-08-4.35475868E-12 7.33171062E+03 4.38474772E+01                   4
phch2coch2  7/5/99 ThERMc   9h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 2.32712538E+01 2.57435858E-02-8.90507867E-06 1.39337697E-09-8.12922746E-14    2
 8.48119323E+02-9.36335596E+01-3.04453343E+00 8.95593266E-02-6.90116023E-05    3
 2.75411948E-08-4.49576293E-12 9.76432431E+03 4.68894971E+01                   4
phcoc2h4   7/ 5/99 ThERMc   9h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.37012877E+01 2.55632683E-02-8.88177489E-06 1.39363094E-09-8.14595243E-14    2
 3.05045253E+04-9.69178455E+01-2.75443373E+00 9.08941745E-02-7.20233762E-05    3
 2.97163771E-08-5.01683123E-12 3.93793566E+04 4.39830037E+01                   4
phc2h2hco   7/13/99 ThERMc   9h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 2.43396805E+01 2.29488876E-02-7.99206120E-06 1.25607828E-09-7.35059093E-14    2
-1.03809934E+04-1.04678423E+02-4.45326828E+00 9.77441883E-02-8.40254088E-05    3
 3.68956893E-08-6.49941387E-12-1.14134809E+03 4.72765941E+01                   4
phc2h2co    9/ 6/ 6 THERMc   9h   7o   10   0G   300.000  5000.000 1000.000    31
-0.32599351E+01 0.67205213E-01-0.29997287E-04 0.57979261E-08-0.40911016E-12    2
 0.19798719E+05 0.49774338E+02-0.37034855E+01 0.74317016E-01-0.31271353E-04    3
-0.74697875E-08 0.73120138E-11 0.18883758E+05 0.48855797E+02                   4
phcoc2h3  12/ 1/99 ThERMc   9h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
 0.38366776E+02-0.49549057E-02 0.58668638E-05-0.15229780E-08 0.12626792E-12    2
-0.13674750E+05-0.17786017E+03 0.53051919E+00 0.62182847E-01-0.23326973E-04    3
-0.20477078E-08 0.72081490E-12 0.33618213E+03 0.30988880E+02                   4
Bphc3h5ohA 12/11/06THERGc   9h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
 0.21748049E+02 0.29432187E-01-0.87478275E-05 0.12697609E-08-0.73389435E-13    2
-0.35120996E+04-0.82429214E+02-0.47979689E+01 0.10623018E+00-0.94799878E-04    3
 0.47706251E-07-0.10704951E-10 0.38361284E+04 0.54351269E+02                   4
Aphc3h5ohB 12/11/06THERGc   9h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
 0.42609871E+02 0.14871208E-02-0.40950788E-07-0.16070569E-11 0.21257169E-15    2
-0.14006086E+05-0.20249825E+03-0.28198125E+01 0.95189229E-01-0.70355542E-04    3
 0.29562411E-07-0.75149739E-11 0.21227725E+04 0.44798199E+02                   4
Cphc3h5ohB 12/11/06THERGc   9h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
 0.41766689E+02 0.20566636E-02-0.34463035E-07-0.13638766E-10 0.13351331E-14    2
-0.21529559E+05-0.19822910E+03-0.19387363E+01 0.89019664E-01-0.60733699E-04    3
 0.23585216E-07-0.61533278E-11-0.57413350E+04 0.40736298E+02                   4
Bphc3h5ohC 12/12/6 THERMc   9h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.56278980E+01 2.71742952E-02-9.14982234E-06 1.40759294E-09-8.12078708E-14    2
-7.96732596E+03-1.05500570E+02-5.41454336E+00 1.02219649E-01-7.80367976E-05    3
 2.99199282E-08-4.56777226E-12 2.39900315E+03 6.00533071E+01                   4
pbzohAqjB    3/13/07 THEc   9h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1000.000    51
 3.19565431E+01 2.62882126E-02-9.34949766E-06 1.49004559E-09-8.80437571E-14    2
-2.64172679E+04-1.36826090E+02-3.17466752E+00 1.11126079E-01-8.88134603E-05    3
 3.58635381E-08-5.86576689E-12-1.44890054E+04 5.08828040E+01                   4
pbzohBqjC    3/13/07 THEc   9h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1395.000    51
 3.27032733E+01 2.57270580E-02-9.17338705E-06 1.46447770E-09-8.66360485E-14    2
-2.83875449E+04-1.41158304E+02-4.44255203E+00 1.16886944E-01-9.60843767E-05    3
 3.97166890E-08-6.61490372E-12-1.59406599E+04 5.67652602E+01                   4
pbzohCqjB    3/13/07 THEc   9h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1395.000    51
 3.27032733E+01 2.57270580E-02-9.17338705E-06 1.46447770E-09-8.66360485E-14    2
-2.83875449E+04-1.41158304E+02-4.44255203E+00 1.16886944E-01-9.60843767E-05    3
 3.97166890E-08-6.61490372E-12-1.59406599E+04 5.67652602E+01                   4
Cophc3h4-1 12/12/6 THERMc   9h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 2.51730730E+01 2.36753732E-02-8.01815748E-06 1.23843432E-09-7.16504593E-14    2
 1.04394911E+04-1.06613466E+02-6.47405067E+00 1.04577612E-01-8.77058889E-05    3
 3.70258549E-08-6.22136179E-12 2.05936790E+04 6.06489707E+01                   4
Aophc3h4-2 12/12/6 THERMc   9h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
-0.39560852E+01 0.68859898E-01-0.28853545E-04 0.53335851E-08-0.36449161E-12    2
 0.22584219E+05 0.56222107E+02-0.69234300E+01 0.10561591E+00-0.85967440E-04    3
 0.29665280E-07-0.14717237E-11 0.20350043E+05 0.60686974E+02                   4
ch3c6h4c2h3           c   9h  10    0    0G   300.000  5000.000 1387.000    1
 2.13664963e+01 2.79354157e-02-9.69178877e-06 1.51917696e-09-8.87326037e-14    2
 2.91092188e+03-9.00111261e+01-2.76029596e+00 8.32252436e-02-5.85472575e-05    3
 2.14521211e-08-3.26642304e-12 1.14654148e+04 4.00613508e+01                   4
ch3c6h4c2h5           c   9h  12    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    1
 2.29271900e+01 3.04089660e-02-1.03593788e-05 1.60461730e-09-9.29658996e-14    2
-1.21377244e+04-9.84493825e+01-4.41852383e+00 9.35245334e-02-6.54171104e-05    3
 2.31989742e-08-3.30851599e-12-2.62791031e+03 4.85805625e+01                   4
c14h14                c  14h  14    0    0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.72920350E+01 0.92502000E-01-0.51686410E-04 0.13627090E-07-0.13811480E-11    2
 0.10316730E+05-0.11327380E+02-0.13889580E+02 0.17209840E+00-0.17006600E-03    3
 0.96018880E-07-0.23732530E-10 0.15032340E+05 0.92707360E+02                   4
napht                 c  10h   8    0    0G   300.000  5000.000 1000.00      1
 0.19726501E+02 0.28167639E-01-0.96896429E-05 0.14654855E-08-0.80134955E-13    2
 0.85581797E+04-0.86036400E+02-0.46547480E+01 0.74611127E-01-0.53069607E-05    3
-0.54125859E-07 0.29066527E-10 0.16325324E+05 0.45018630E+02                   4
biphenyl          burct c  12h  10    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.24289017e 02 0.34006648e-01-0.11722408e-04 0.17729298e-08-0.96812532e-13    2
 0.10287000e 05-0.10802374e 03-0.40739527e 01 0.86973310e-01-0.42353613e-05    3
-0.64564460e-07 0.34150169e-10 0.19405965e 05 0.44741348e 02                   4
c10h9                 c  10h   9    0    0G   200.000  6000.000 1000.00      1
 1.96879334E+01 3.20520257E-02-1.16715110E-05 1.90182471E-09-1.14603906E-13    2
 1.80099777E+04-8.29833882E+01-1.21356342E+00 5.48913745E-02 5.55281159E-05    3
-1.24860759E-07 5.75105005E-11 2.52575495E+04 3.28077928E+01                   4
c10h10                c  10h  10    0    0G   200.000  6000.000  1000.00     1
 1.92211178E+01 3.51247274E-02-1.27719042E-05 2.07903232E-09-1.25191968E-13    2
 4.39595221E+03-8.19390283E+01-1.92135165E-01 4.50394780E-02 8.64482370E-05    3
-1.56640588E-07 6.88727900E-11 1.16587583E+04 2.82951960E+01                   4
U-c6h5                c   6h   50   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 1.72154000E+01 8.62106800E-03-8.22134000E-07-4.75216400E-10 8.84408600E-14    2
 6.40440300E+04-6.37727800E+01 4.85426800E+00 3.03165900E-02 1.74289200E-07    3
-1.81101000E-08 7.39251100E-12 6.81732300E+04 3.47340700E+00                   4
c6h4c2h               c   8h   50   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 9.43202080E+00 3.25329290E-02-1.68709990E-05 4.20594250E-09-4.09400480E-13    2
 6.23576270E+04-2.48636700E+01-4.56114890E+00 8.13046740E-02-8.13362740E-05    3
 4.22006150E-08-8.72984310E-12 6.56187700E+04 4.46738350E+01                   4
A1c2hAC               c  10h   7    0    0G   300.000  5000.000 1000.00      1
 1.21998720E+01 4.24216550E-02-2.18133560E-05 5.39916760E-09-5.22371160E-13    2
 6.75357020E+04-3.55326290E+01-2.87461430E+00 9.35986380E-02-8.71626910E-05    3
 4.21237400E-08-8.01506440E-12 7.11222060E+04 3.97275660E+01                   4
A2-X                  c  10h   7    0    0G   300.000  5000.000 1000.00      1
 9.14717570E+00 4.80582360E-02-2.53147210E-05 6.38292050E-09-6.26509890E-13    2
 4.17725310E+04-2.59244170E+01-6.02056560E+00 9.04003210E-02-6.16294130E-05    3
 1.13763900E-08 3.50244490E-12 4.57999680E+04 5.19691610E+01                   4
A2O                   c  10h   7o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 1.77268430E+01 1.08095730E-02 4.74606580E-06 9.95701080E-10-6.69728000E-13    2
 9.57138280E+03-5.77990530E+01-8.58593850E+00 6.84750150E-02-9.20467850E-06    3
-3.88479680E-08 2.17720230E-11 1.71742660E+04 8.09439620E+01                   4
A2oh                  c  10h   8o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 2.85889590E+01 1.08775460E-02 2.32494290E-06 9.02891860E-11 2.85658840E-13    2
-1.57408270E+04-1.27026820E+02-2.56072540E-03 6.94127830E-02-8.76392640E-06    3
-3.89715850E-08 2.04926840E-11-6.99657370E+03 2.54545150E+01                   4
A1c2h3AC              c  10h   9    0    0G   200.000  6000.000 1000.00      1
 6.39681670E+00 2.09505090E-02 1.41400130E-05 1.65506210E-09-6.81654990E-12    2
 5.25843790E+04 1.42662500E+01-4.24241480E-01 7.39664960E-02-2.61253810E-05    3
-4.95778250E-08 3.84868040E-11 5.00668090E+04 3.42529680E+01                   4
indenyl               c   9h   70   00   0G   300.0    3000.0   1000.0       1
 1.31457040E+01 1.51377560E-02 8.60589080E-06 1.08657830E-09-3.46351350E-12    2
 3.40730660E+04-3.68146590E+01-1.16719530E+01 7.28180630E-02-7.96013860E-06    3
-3.95516300E-08 2.08780720E-11 4.08638200E+04 9.26830670E+01                   4
! Aromatics : Butylbenzene
phc4h9     6/ 3/99      c  10h   14   0    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.67352334E+01 3.43477266E-02-1.17087252E-05 1.81434544E-09-1.05143951E-13    2
-1.51216286E+04-1.18171023E+02-6.22856223E+00 1.13691752E-01-8.50361112E-05    3
 3.27496505E-08-5.12339478E-12-3.97172741E+03 5.79294597E+01                   4
Aphc4h8    6/ 3/99      c  10h   13   0    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.63195668E+01 3.22014066E-02-1.09791469E-05 1.70158839E-09-9.86239739E-14    2
 9.94241670E+03-1.13082008E+02-5.45675956E+00 1.09122905E-01-8.25272801E-05    3
 3.20915301E-08-5.06141805E-12 2.06406285E+04 5.65096112E+01                   4
Bphc4h8    6/ 3/99      c  10h   130  00   0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 2.62094455E+01 3.18543753E-02-1.07757053E-05 1.66215541E-09-9.60490097E-14    2
 8.53697685E+03-1.12088233E+02-4.89499625E+00 1.03472638E-01-7.25748996E-05    3
 2.53788579E-08-3.50769312E-12 1.93152099E+04 5.51207574E+01                   4
Cphc4h8    6/ 3/99      c  10h   130  00   0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 2.62094455E+01 3.18543753E-02-1.07757053E-05 1.66215541E-09-9.60490097E-14    2
 8.53697685E+03-1.12088233E+02-4.89499625E+00 1.03472638E-01-7.25748996E-05    3
 2.53788579E-08-3.50769312E-12 1.93152099E+04 5.51207574E+01                   4
Dphc4h8    6/ 3/99      c  10h   130  00   0G   300.000  5000.000 1393.000    41
 2.70273993E+01 3.21704122E-02-1.10893400E-05 1.73097280E-09-1.00815459E-13    2
 2.35147019E+03-1.20696474E+02-3.97290080E+00 1.05990334E-01-7.87536684E-05    3
 3.01569625E-08-4.71350779E-12 1.29600077E+04 4.52696443E+01                   4
Dphsecb    8/31/ 6 THERMc  10h  13    0    0G   300.000  5000.000 1397.000    41
 2.62310937E+01 3.25543809E-02-1.11577719E-05 1.73503839E-09-1.00786050E-13    2
 9.23125104E+03-1.11588995E+02-6.02790900E+00 1.11480583E-01-8.57361173E-05    3
 3.40464370E-08-5.49532858E-12 2.00312696E+04 6.03194178E+01                   4
phc4h7-3   6/ 8/99 ThERMc  10h  12    0    0G   300.000  5000.000 1395.000    31
 2.53129170E+01 3.14213887E-02-1.08152689E-05 1.68620292E-09-9.81246226E-14    2
-1.40337072E+03-1.10601858E+02-5.52864894E+00 1.07276062E-01-8.33212344E-05    3
 3.36538598E-08-5.55115817E-12 8.92646491E+03 5.36875671E+01                   4
phc4h7-2   6/ 8/99 ThERMc  10h  12    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.43902403E+01 3.24004931E-02-1.11925596E-05 1.74946782E-09-1.01985620E-13    2
-2.45450569E+02-1.04802041E+02-5.93522992E+00 1.04404463E-01-7.72345306E-05    3
 2.96299900E-08-4.66636566E-12 1.01859490E+04 5.76804055E+01                   4
phc4h7-1   6/ 8/99 ThERMc  10h  12    0    0G   300.000  5000.000 1396.000    31
 2.56327022E+01 3.06080886E-02-1.04190973E-05 1.61318568E-09-9.34399509E-14    2
 8.18387633E+02-1.11127142E+02-6.54800245E+00 1.10347314E-01-8.66280506E-05    3
 3.49310042E-08-5.69147696E-12 1.14558141E+04 5.99487246E+01                   4
Bphc4h6-3  7/ 5/99      c  10h   11   0    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.47070740E+01 2.90264191E-02-9.91397307E-06 1.53860047E-09-8.92709004E-14    2
 2.23032232E+04-1.04039398E+02-4.37243296E+00 9.78810028E-02-7.21054814E-05    3
 2.70409791E-08-4.09629384E-12 3.22392342E+04 5.16926203E+01                   4
Cphc4h6-1  7/ 5/99      c  10h   11   0    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 2.51229558E+01 2.81005272E-02-9.48298210E-06 1.46083903E-09-8.43531064E-14    2
 2.44662758E+04-1.05142326E+02-5.17174396E+00 9.99499536E-02-7.39211502E-05    3
```

```
 2.74237635E-08-4.04934030E-12 3.47360317E+04 5.69401550E+01                 4
Dphc4h6-1  7/ 5/99      c  10h  11    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.59340983E+01 2.84263046E-02-9.79818843E-06 1.52952343E-09-8.90909075E-14    2
 1.82936918E+04-1.13694812E+02-4.31081400E+00 1.02842357E-01-8.07007396E-05    3
 3.25777716E-08-5.33680982E-12 2.83870153E+04 4.73493640E+01                 4
phc4h5     7/13/99 ThERMc  10h  10    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    21
 2.51177291E+01 2.71079788E-02-9.36415847E-06 1.46361840E-09-8.53182081E-14    2
 1.23688395E+04-1.10413157E+02-6.13672076E+00 1.09990763E-01-9.57033138E-05    3
 4.29399928E-08-7.72933039E-12 2.22598478E+04 5.39819170E+01                 4
phc4h8ojA    6/ 3/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.84513486E+01 3.32063635E-02-1.14739814E-05 1.79387989E-09-1.04595186E-13    2
-7.55212227E+03-1.22499678E+02-5.30615619E+00 1.15113502E-01-8.83561440E-05    3
 3.49764035E-08-5.64138940E-12 3.84810478E+03 5.76884946E+01                 4
phc4h8ojB    6/ 3/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    61
 2.89950874E+01 3.27117416E-02-1.12953327E-05 1.76509703E-09-1.02881048E-13    2
-9.85437258E+03-1.26409892E+02-5.76019225E+00 1.19264276E-01-9.50280784E-05    3
 3.90501895E-08-6.50879318E-12 1.65099626E+03 5.82986152E+01                 4
phc4h8ojC    6/ 3/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    61
 2.89950874E+01 3.27117416E-02-1.12953327E-05 1.76509703E-09-1.02881048E-13    2
-9.85437258E+03-1.26409892E+02-5.76019225E+00 1.19264276E-01-9.50280784E-05    3
 3.90501895E-08-6.50879318E-12 1.65099626E+03 5.82986152E+01                 4
phc4h8ojD    6/ 3/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.94596622E+01 3.21058244E-02-1.10459202E-05 1.72245524E-09-1.00263509E-13    2
-9.58226117E+03-1.29304628E+02-6.76952885E+00 1.21689929E-01-9.65915717E-05    3
 3.91507891E-08-6.40399151E-12 2.42637877E+03 6.33845304E+01                 4
phc4h8qjA    6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.00614649E+01 3.44244713E-02-1.19953629E-05 1.88571463E-09-1.10362452E-13    2
-8.83435174E+03-1.27463376E+02-3.26587503E+00 1.14432007E-01-8.70298215E-05    3
 3.46180084E-08-5.68639905E-12 2.60987705E+03 5.09068087E+01                 4
phc4h8qjB    6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.06747172E+01 3.38518540E-02-1.17861965E-05 1.85183804E-09-1.08339822E-13    2
-1.06726621E+04-1.31483945E+02-3.91962734E+00 1.19337110E-01-9.46664205E-05    3
 3.92235446E-08-6.66222898E-12 9.49580676E+02 5.27803492E+01                 4
phc4h8qjC    6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.06747172E+01 3.38518540E-02-1.17861965E-05 1.85183804E-09-1.08339822E-13    2
-1.06726621E+04-1.31483945E+02-3.91962734E+00 1.19337110E-01-9.46664205E-05    3
 3.92235446E-08-6.66222898E-12 9.49580676E+02 5.27803492E+01                 4
phc4h8qjD    6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.07774458E+01 3.39562166E-02-1.18660582E-05 1.86898805E-09-1.09531583E-13    2
-1.03072015E+04-1.32445197E+02-4.48710953E+00 1.19983949E-01-9.40568926E-05    3
 3.84020224E-08-6.43864687E-12 1.65485484E+03 5.57904380E+01                 4
bbzqA        6/3/99     c  10h  14o   2    0G   300.000 5000.000 1392.000    61
 3.20065100E+01 3.52390466E-02-1.22591795E-05 1.92517610E-09-1.12592895E-13    2
-2.78611688E+04-1.39446935E+02-4.34731205E+00 1.23976480E-01-9.66502396E-05    3
 3.90676022E-08-6.45939531E-12-1.55834398E+04 5.45018094E+01                 4
bbzqB        6/3/99     c  10h  14o   2    0G   300.000 5000.000 1394.000    61
 3.26656531E+01 3.46918358E-02-1.20729164E-05 1.89633800E-09-1.10922550E-13    2
-2.97300156E+04-1.43770581E+02-5.67396621E+00 1.32067178E-01-1.09151697E-04    3
 4.67567747E-08-8.12851930E-12-1.71474860E+04 5.94498425E+01                 4
bbzqC        6/3/99     c  10h  14o   2    0G   300.000 5000.000 1394.000    61
 3.26656531E+01 3.46918358E-02-1.20729164E-05 1.89633800E-09-1.10922550E-13    2
-2.97300156E+04-1.43770581E+02-5.67396621E+00 1.32067178E-01-1.09151697E-04    3
 4.67567747E-08-8.12851930E-12-1.71474860E+04 5.94498425E+01                 4
bbzqD        6/3/99     c  10h  14o   2    0G   300.000 5000.000 1392.000    61
 3.27472154E+01 3.48071628E-02-1.21549070E-05 1.91364021E-09-1.12115639E-13    2
-2.93529434E+04-1.44602154E+02-6.14874040E+00 1.32282089E-01-1.07905808E-04    3
 4.55411998E-08-7.81742762E-12-1.64555397E+04 6.20355219E+01                 4

bbzqDrD           THERMc  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 3.13153832E+01 3.34453666E-02-1.16772718E-05 1.83816032E-09-1.07679974E-13    2
-7.57192717E+03-1.31511282E+02-2.15780771E+00 1.14097452E-01-8.76325717E-05    3
```

```
 3.51133065E-08-5.79840538E-12 3.88911318E+03 4.75291577E+01                 4
bbzqDrC       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    61
 3.18818252E+01 3.27029227E-02-1.13668697E-05 1.78433731E-09-1.04337691E-13    2
-5.51050095E+03-1.36501133E+02-4.64927400E+00 1.21423535E-01-9.46502187E-05    3
 3.77087559E-08-6.09386626E-12 6.80419866E+03 5.84407930E+01                 4
bbzqDrB       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    61
 3.18818252E+01 3.27029227E-02-1.13668697E-05 1.78433731E-09-1.04337691E-13    2
-5.51050095E+03-1.36501133E+02-4.64927400E+00 1.21423535E-01-9.46502187E-05    3
 3.77087559E-08-6.09386626E-12 6.80419866E+03 5.84407930E+01                 4
bbzqDrA       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.23416944E+01 3.26368560E-02-1.14136621E-05 1.79871002E-09-1.05454936E-13    2
-4.29020513E+03-1.39972349E+02-5.39584773E+00 1.27786578E-01-1.05483905E-04    3
 4.49174607E-08-7.75903855E-12 8.15989638E+03 6.02974673E+01                 4
bbzqCrD       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.33541264E+01 3.17821275E-02-1.11198685E-05 1.75295136E-09-1.02794344E-13    2
-1.23687401E+04-1.48427954E+02-3.45244591E+00 1.24448659E-01-1.02600045E-04    3
 4.36315547E-08-7.52935763E-12-2.10671816E+02 4.69521983E+01                 4
bbzqCrC                 c  10h  13o   2    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48603951E+02 0.38860326E-02-0.24548314E-06 0.39682532E-11 0.40945443E-15    2
-0.14474516E+05-0.22900461E+03-0.21343935E+01 0.11672846E+00-0.99965386E-04    3
 0.51907797E-07-0.14269402E-10 0.29605872E+04 0.44767147E+02                 4
bbzqCrB       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 3.18422816E+01 3.24698640E-02-1.12271789E-05 1.75633139E-09-1.02455246E-13    2
-5.89299487E+03-1.35876678E+02-4.07263209E+00 1.20687165E-01-9.50377782E-05    3
 3.83187917E-08-6.25639461E-12 6.09860094E+03 5.53970916E+01                 4
bbzqCrA       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 3.22604515E+01 3.25227329E-02-1.13323636E-05 1.78154075E-09-1.04270472E-13    2
-4.66172730E+03-1.39129126E+02-4.78631852E+00 1.27080419E-01-1.06072877E-04    3
 4.57551016E-08-7.99113323E-12 7.44451305E+03 5.70644586E+01                 4
bbzqBrD       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.33541264E+01 3.17821275E-02-1.11198685E-05 1.75295136E-09-1.02794344E-13    2
-1.23687401E+04-1.48427954E+02-3.45244591E+00 1.24448659E-01-1.02600045E-04    3
 4.36315547E-08-7.52935763E-12-2.10671816E+02 4.69521983E+01                 4
bbzqBrC       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 3.18422816E+01 3.24698640E-02-1.12271789E-05 1.75633139E-09-1.02455246E-13    2
-5.89299487E+03-1.35876678E+02-4.07263209E+00 1.20687165E-01-9.50377782E-05    3
 3.83187917E-08-6.25639461E-12 6.09860094E+03 5.53970916E+01                 4
bbzqBrB                 c  10h  13o   2    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48603951E+02 0.38860326E-02-0.24548314E-06 0.39682532E-11 0.40945443E-15    2
-0.14474516E+05-0.22900461E+03-0.21343935E+01 0.11672846E+00-0.99965386E-04    3
 0.51907797E-07-0.14269402E-10 0.29605872E+04 0.44767147E+02                 4
bbzqBrA       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 3.22604515E+01 3.25227329E-02-1.13323636E-05 1.78154075E-09-1.04270472E-13    2
-4.66172730E+03-1.39129126E+02-4.78631852E+00 1.27080419E-01-1.06072877E-04    3
 4.57551016E-08-7.99113323E-12 7.44451305E+03 5.70644586E+01                 4
bbzqArD       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.26767371E+01 3.23776648E-02-1.13300048E-05 1.78626095E-09-1.04755030E-13    2
-1.05029989E+04-1.44024132E+02-2.14812385E+00 1.16403004E-01-9.01517990E-05    3
 3.59940318E-08-5.87694902E-12 1.35840669E+03 4.21199168E+01                 4
bbzqArC       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.14198963E+01 3.26810535E-02-1.12705020E-05 1.76026101E-09-1.02576929E-13    2
-4.11153409E+03-1.32891207E+02-3.55665234E+00 1.16230086E-01-8.77654223E-05    3
 3.37084952E-08-5.23564316E-12 7.78326711E+03 5.41910876E+01                 4
bbzqArB       6/ 3/99    c  10h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.14198963E+01 3.26810535E-02-1.12705020E-05 1.76026101E-09-1.02576929E-13    2
-4.11153409E+03-1.32891207E+02-3.55665234E+00 1.16230086E-01-8.77654223E-05    3
 3.37084952E-08-5.23564316E-12 7.78326711E+03 5.41910876E+01                 4
bbzqArA                 c  10h  13o   2    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.51059887E+02 0.67487489E-02-0.72247070E-06 0.46707516E-10-0.15189197E-14    2
-0.30197889E+05-0.23812460E+03-0.27723112E+01 0.12189330E+00-0.80158228E-04    3
 0.18925707E-07-0.75960532E-12-0.12027512E+05 0.52204906E+02                 4
```

```
bbzqDqjC      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.73197468E+01 3.29715668E-02-1.16020000E-05 1.83593221E-09-1.07946184E-13    2
-2.50457513E+04-1.60833117E+02-3.89885602E+00 1.37735854E-01-1.16267565E-04    3
 5.03759924E-08-8.82462112E-12-1.15163295E+04 5.76396456E+01                 4
bbzqDqjB      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.73197468E+01 3.29715668E-02-1.16020000E-05 1.83593221E-09-1.07946184E-13    2
-2.50457513E+04-1.60833117E+02-3.89885602E+00 1.37735854E-01-1.16267565E-04    3
 5.03759924E-08-8.82462112E-12-1.15163295E+04 5.76396456E+01                 4
bbzqDqjA      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.67274879E+01 3.35260481E-02-1.18049653E-05 1.86885617E-09-1.09914267E-13    2
-2.27165154E+04-1.57321477E+02-3.48941013E+00 1.33899868E-01-1.10202388E-04    3
 4.67337714E-08-8.05969130E-12-9.31536157E+03 5.65236044E+01                 4
bbzqCqjD      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.73197468E+01 3.29715668E-02-1.16020000E-05 1.83593221E-09-1.07946184E-13    2
-2.50457513E+04-1.60833117E+02-3.89885602E+00 1.37735854E-01-1.16267565E-04    3
 5.03759924E-08-8.82462112E-12-1.15163295E+04 5.76396456E+01                 4
bbzqCqjB      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1392.000    81
 3.72396298E+01 3.28927246E-02-1.15408512E-05 1.82273617E-09-1.07026473E-13    2
-2.54411390E+04-1.60052616E+02-3.54323922E+00 1.37881756E-01-1.17905029E-04    3
 5.17991893E-08-9.17897263E-12-1.21857164E+04 5.56409557E+01                 4
bbzqCqjA      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.66529161E+01 3.34364068E-02-1.17385220E-05 1.85465244E-09-1.08927981E-13    2
-2.30915490E+04-1.56525904E+02-3.22710630E+00 1.34881305E-01-1.13417523E-04    3
 4.92490493E-08-8.66978272E-12-9.98216293E+03 5.48684391E+01                 4
bbzqBqjD      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.73197468E+01 3.29715668E-02-1.16020000E-05 1.83593221E-09-1.07946184E-13    2
-2.50457513E+04-1.60833117E+02-3.89885602E+00 1.37735854E-01-1.16267565E-04    3
 5.03759924E-08-8.82462112E-12-1.15163295E+04 5.76396456E+01                 4
bbzqBqjC      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1392.000    81
 3.72396298E+01 3.28927246E-02-1.15408512E-05 1.82273617E-09-1.07026473E-13    2
-2.54411390E+04-1.60052616E+02-3.54323922E+00 1.37881756E-01-1.17905029E-04    3
 5.17991893E-08-9.17897263E-12-1.21857164E+04 5.56409557E+01                 4
bbzqBqjA      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.66529161E+01 3.34364068E-02-1.17385220E-05 1.85465244E-09-1.08927981E-13    2
-2.30915490E+04-1.56525904E+02-3.22710630E+00 1.34881305E-01-1.13417523E-04    3
 4.92490493E-08-8.66978272E-12-9.98216293E+03 5.48684391E+01                 4
bbzqAqjD      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    81
 3.67274879E+01 3.35260481E-02-1.18049653E-05 1.86885617E-09-1.09914267E-13    2
-2.27165154E+04-1.57321477E+02-3.48941013E+00 1.33899868E-01-1.10202388E-04    3
 4.67337714E-08-8.05969130E-12-9.31536157E+03 5.65236044E+01                 4
bbzqAqjC      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.66529161E+01 3.34364068E-02-1.17385220E-05 1.85465244E-09-1.08927981E-13    2
-2.30915490E+04-1.56525904E+02-3.22710630E+00 1.34881305E-01-1.13417523E-04    3
 4.92490493E-08-8.66978272E-12-9.98216293E+03 5.48684391E+01                 4
bbzqAqjB      99  ThERM c  10h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 3.66529161E+01 3.34364068E-02-1.17385220E-05 1.85465244E-09-1.08927981E-13    2
-2.30915490E+04-1.56525904E+02-3.22710630E+00 1.34881305E-01-1.13417523E-04    3
 4.92490493E-08-8.66978272E-12-9.98216293E+03 5.48684391E+01                 4

bbzoCqD       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000  922.000    61
 3.04170624E+02 1.59753829E-01-7.77989714E-05 1.52351149E-08-1.03803728E-12    2
-2.33324879E+05-1.95661541E+03 7.98193546E+02-6.22889547E+00 1.57338562E-02    3
-1.44008926E-05 4.50196441E-09-9.99306829E+04-3.20653847E+03                 4
bbzoBqD       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 3.32203594E+01 3.20804742E-02-1.12652374E-05 1.78018888E-09-1.04568173E-13    2
-4.26270615E+04-1.43078260E+02-3.53491176E+00 1.22738370E-01-9.88568978E-05    3
 4.11083699E-08-6.97356018E-12-3.02793303E+04 5.27289246E+01                 4
bbzoAqD       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.34678308E+01 3.18186095E-02-1.11628270E-05 1.76289371E-09-1.03506517E-13    2
-3.88627053E+04-1.43715988E+02-2.98711536E+00 1.22230054E-01-9.90292264E-05    3
 4.14257145E-08-7.06013074E-12-2.66697555E+04 5.03079159E+01                 4
```

```
bbzoDqC       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 3.42579373E+01 3.10810453E-02-1.08939677E-05 1.71944686E-09-1.00917661E-13    2
-1.29900278E+04-1.49888746E+02-4.64180376E+00 1.30016034E-01-1.09306832E-04    3
 4.69584248E-08-8.13062352E-12-2.82058740E+02 5.61786177E+01                 4
bbzoBqC       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.36734804E+01 3.15898633E-02-1.10723623E-05 1.74760322E-09-1.02569998E-13    2
-4.26116369E+04-1.45792573E+02-4.76743980E+00 1.28051250E-01-1.05570223E-04    3
 4.45316371E-08-7.59402941E-12-2.99240412E+04 5.83058545E+01                 4
bbzoAqC       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 3.33806026E+01 3.16761016E-02-1.10642378E-05 1.74223753E-09-1.02086934E-13    2
-3.92264996E+04-1.42826031E+02-2.46304489E+00 1.21819085E-01-1.00002241E-04    3
 4.24577272E-08-7.32586988E-12-2.73697549E+04 4.74892243E+01                 4
bbzoDqB       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1391.000    61
 3.36726156E+01 3.15259909E-02-1.10345070E-05 1.73992324E-09-1.02047241E-13    2
-1.33627844E+04-1.46053045E+02-2.68620243E+00 1.23388659E-01-1.02246011E-04    3
 4.37989670E-08-7.61792966E-12-1.36674405E+03 4.68663270E+01                 4
bbzoCqB       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1391.000    61
 3.35272823E+01 3.17155615E-02-1.11151484E-05 1.75414800E-09-1.02943293E-13    2
-4.26373309E+04-1.44609387E+02-4.33502426E+00 1.28416013E-01-1.08313643E-04    3
 4.71152301E-08-8.29434144E-12-3.02459913E+04 5.59244546E+01                 4
bbzoAqB       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 3.39473225E+01 3.12721509E-02-1.09433590E-05 1.72540007E-09-1.01192143E-13    2
-3.88495215E+04-1.46562230E+02-4.28671761E+00 1.27882526E-01-1.06253311E-04    3
 4.51440838E-08-7.74018747E-12-2.63056046E+04 5.61859706E+01                 4
bbzoDqA       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 3.30876745E+01 3.20379866E-02-1.12147834E-05 1.76846890E-09-1.03726547E-13    2
-1.10281184E+04-1.42562236E+02-2.23307538E+00 1.19350042E-01-9.58658986E-05    3
 3.99355328E-08-6.79805521E-12 8.27835480E+02 4.55496707E+01                 4
bbzoCqA       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    61
 3.23768675E+01 3.26306098E-02-1.14160290E-05 1.79949197E-09-1.05515262E-13    2
-4.06811904E+04-1.37391918E+02-2.05769135E+00 1.18288570E-01-9.56214578E-05    3
 4.05181941E-08-7.04831403E-12-2.91150439E+04 4.59132655E+01                 4
bbzoBqA       99 ThERM c  10h  12o   3    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.23611140E+01 3.26857545E-02-1.14446936E-05 1.80500228E-09-1.05879021E-13    2
-3.97375501E+04-1.37482665E+02-6.65998176E-01 1.12253443E-01-8.67416618E-05    3
 3.51235082E-08-5.88315237E-12-2.83889589E+04 3.92427693E+01                 4
bbzohDrC      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.89616045E+01 3.13860028E-02-1.05684490E-05 1.62583700E-09-9.37976226E-14    2
-1.21309203E+04-1.23119546E+02-5.66970835E+00 1.14414123E-01-8.60977131E-05    3
 3.25990800E-08-4.92367334E-12-4.81961655E+02 6.18453183E+01                 4
bbzohCrD      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    51
 2.92194984E+01 3.23735228E-02-1.11452601E-05 1.73813247E-09-1.01165853E-13    2
-1.85345570E+04-1.28255942E+02-3.78697371E+00 1.14666690E-01-9.09918967E-05    3
 3.74502620E-08-6.26920720E-12-7.60302466E+03 4.71488188E+01                 4
bbzohCrB      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    51
 2.83667165E+01 3.20931153E-02-1.08429774E-05 1.67082144E-09-9.64713801E-14    2
-1.23304315E+04-1.19446010E+02-4.94261624E+00 1.13128783E-01-8.62235537E-05    3
 3.35119458E-08-5.24087878E-12-1.21085375E+03 5.80940852E+01                 4
bbzohBrC      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    51
 2.63327875E+01 3.24449184E-02-1.17374113E-05 1.98555802E-09-1.23755305E-13    2
 1.18972142E+04-1.05029728E+02-5.70985590E+00 1.13843465E-01-9.24499264E-05    3
 3.89125224E-08-6.64168643E-12 2.23577549E+04 6.47187471E+01                 4
bbzohArB      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.83181157E+01 3.17223082E-02-1.06388494E-05 1.63214024E-09-9.39768846E-14    2
-1.01875596E+04-1.18238369E+02-4.34777611E+00 1.08228515E-01-7.79405448E-05    3
 2.80187822E-08-3.98042093E-12 9.65972335E+02 5.68453377E+01                 4
bbzohBrA      7/13/99    c  10h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    51
 2.84776089E+01 3.24462572E-02-1.10511628E-05 1.71135092E-09-9.91269570E-14    2
-1.09280253E+04-1.19758733E+02-5.43374476E+00 1.18481868E-01-9.57580042E-05    3
 3.99838837E-08-6.74527711E-12 1.03473911E+02 5.98420307E+01                 4
bbzohDqjC     7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1393.000    71
```

```
 3.30311013E+01 3.40408082E-02-1.18669584E-05 1.86612850E-09-1.09241991E-13    2
-3.12136098E+04-1.40145192E+02-4.56302972E+00 1.29702810E-01-1.07695326E-04    3
 4.64604389E-08-8.14383918E-12-1.88655146E+04 5.91077689E+01                   4
bbzohCqjD    7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1393.000    71
 3.30311013E+01 3.40408082E-02-1.18669584E-05 1.86612850E-09-1.09241991E-13    2
-3.12136098E+04-1.40145192E+02-4.56302972E+00 1.29702810E-01-1.07695326E-04    3
 4.64604389E-08-8.14383918E-12-1.88655146E+04 5.91077689E+01                   4
bbzohCqjB    7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1395.000    71
 3.29364059E+01 3.39225620E-02-1.17808500E-05 1.84785988E-09-1.07979547E-13    2
-3.15819175E+04-1.39228613E+02-4.00804466E+00 1.29104151E-01-1.08364411E-04    3
 4.73103694E-08-8.37213499E-12-1.95687320E+04 5.61569241E+01                   4
bbzohBqjC    7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1395.000    71
 3.29364059E+01 3.39225620E-02-1.17808500E-05 1.84785988E-09-1.07979547E-13    2
-3.15819175E+04-1.39228613E+02-4.00804466E+00 1.29104151E-01-1.08364411E-04    3
 4.73103694E-08-8.37213499E-12-1.95687320E+04 5.61569241E+01                   4
bbzohAqjB    7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1393.000    71
 3.23285489E+01 3.44987580E-02-1.19929976E-05 1.88237898E-09-1.10046608E-13    2
-2.92442159E+04-1.35622946E+02-3.50693341E+00 1.24895212E-01-1.01776032E-04    3
 4.33597130E-08-7.54161678E-12-1.73825613E+04 5.46091474E+01                   4
bbzohBqjA    7/99 ThERM c  10h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1393.000    71
 3.23285489E+01 3.44987580E-02-1.19929976E-05 1.88237898E-09-1.10046608E-13    2
-2.92442159E+04-1.35622946E+02-3.50693341E+00 1.24895212E-01-1.01776032E-04    3
 4.33597130E-08-7.54161678E-12-1.73825613E+04 5.46091474E+01                   4
bbze3ojB   7/12/99 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 2.90523370E+01 2.74093716E-02-9.35266850E-06 1.45119408E-09-8.42075299E-14    2
 3.90646596E+03-1.27911635E+02-6.32652451E+00 1.18475473E-01-1.00227313E-04    3
 4.29962855E-08-7.37102989E-12 1.52502708E+04 5.89438651E+01                   4
bbze1ojC   7/12/99 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    41
 2.99116577E+01 2.62545201E-02-8.87069640E-06 1.36803699E-09-7.90685061E-14    2
 5.84498598E+03-1.31753020E+02-1.01823067E+01 1.33514918E-01-1.19699450E-04    3
 5.34849264E-08-9.41224521E-12 1.82188656E+04 7.84384040E+01                   4
bbze1ojD     7/99 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.83699212E+01 2.83475701E-02-9.74832523E-06 1.51990438E-09-8.84729649E-14    2
 6.35212179E+03-1.23023597E+02-7.09355624E+00 1.18355254E-01-9.81812632E-05    3
 4.13217340E-08-6.96841554E-12 1.78548529E+04 6.47375234E+01                   4

bbzoA      6/25/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.75646354E+01 3.12882751E-02-1.06982498E-05 1.66145757E-09-9.64426774E-14    2
-2.46934326E+04-1.18156017E+02-3.75160836E+00 1.06773644E-01-8.08484799E-05    3
 3.15640514E-08-5.01954417E-12-1.40851567E+04 4.91509602E+01                   4
bbzoB        6/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.70030868E+01 3.21461069E-02-1.10730626E-05 1.72776964E-09-1.00607093E-13    2
-2.83655077E+04-1.15822609E+02-4.13293443E+00 1.06674352E-01-8.01004902E-05    3
 3.11875077E-08-4.97808157E-12-1.77223059E+04 5.07796723E+01                   4
bbzoC        6/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 2.76947641E+01 3.08382158E-02-1.04827276E-05 1.62264953E-09-9.40073387E-14    2
-2.86908552E+04-1.19276793E+02-3.81766128E+00 1.07155655E-01-8.21627714E-05    3
 3.26941640E-08-5.32211205E-12-1.80185678E+04 4.90094919E+01                   4
bbzoD      6/25/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.73120493E+01 3.21551542E-02-1.11325655E-05 1.74264104E-09-1.01689924E-13    2
 1.33411725E+03-1.18432390E+02-3.76698397E+00 1.07705017E-01-8.27949735E-05    3
 3.32644865E-08-5.49513569E-12 1.18810204E+04 4.75184610E+01                   4
phc3h6co    3/13/ 7 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.71613488E+01 2.91354761E-02-9.96754951E-06 1.54865806E-09-8.99261089E-14    2
-5.73635738E+03-1.13628390E+02-2.98336368E+00 1.01996937E-01-7.78211415E-05    3
 3.05058994E-08-4.85834625E-12 4.44407908E+03 4.73306397E+01                   4
phhcco                 c   8h   6o   1    0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16157705E+02 0.15957262E-01-0.41883004E-05 0.55646732E-09-0.30321902E-13    2
 0.72529551E+04-0.73237762E+02-0.39635060E+01 0.66037655E-01-0.44058663E-04    3
 0.95476143E-08 0.88439786E-12 0.13193360E+05 0.32383705E+02                   4
phc4h7o-AB  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    31
 2.77634636E+01 3.19566159E-02-1.10123814E-05 1.71860622E-09-1.00080496E-13    2
-1.33020758E+04-1.21940647E+02-1.09331808E+01 1.35517455E-01-1.19634458E-04    3
 5.41172361E-08-9.77533378E-12-1.17987758E+03 8.12159449E+01                   4
phc4h7o-AC  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.68727413E+01 3.30451034E-02-1.13692767E-05 1.77253264E-09-1.03153111E-13    2
-1.37466877E+04-1.19258575E+02-1.19381051E+01 1.34599283E-01-1.15212934E-04    3
 5.06324341E-08-8.92755388E-12-1.38536367E+03 8.52713929E+01                   4
phc4h7o-AD  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.67735806E+01 3.32922438E-02-1.14121606E-05 1.77600856E-09-1.03261952E-13    2
-2.40065331E+04-1.23307611E+02-1.49020484E+01 1.39375913E-01-1.16157940E-04    3
 4.92331657E-08-8.36915399E-12-1.05018112E+04 9.72649566E+01                   4
phc4h7o-BC  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    31
 2.81822143E+01 3.17762095E-02-1.09869659E-05 1.71831813E-09-1.00207714E-13    2
-1.55975048E+04-1.24549093E+02-1.11353572E+01 1.38533982E-01-1.24741027E-04    3
 5.74097944E-08-1.05130529E-11-3.41401160E+03 8.13557978E+01                   4
phc4h7o-BD  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.72571916E+01 3.32325698E-02-1.15453770E-05 1.81144652E-09-1.05875648E-13    2
-1.56401542E+04-1.22098995E+02-1.26166004E+01 1.37934000E-01-1.19416147E-04    3
 5.30848234E-08-9.46958279E-12-2.92934232E+03 8.79820376E+01                   4
phc4h7o-CD  6/3/99 ThERMc  10h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    31
 2.82572068E+01 3.19374957E-02-1.10935110E-05 1.74034091E-09-1.01711015E-13    2
-1.52270909E+04-1.25367213E+02-1.17147029E+01 1.39232101E-01-1.24241424E-04    3
 5.66912774E-08-1.03194439E-11-2.70669779E+03 8.44222263E+01                   4
bbzoArB    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 2.71275209E+01 2.92878335E-02-9.95729149E-06 1.54079541E-09-8.92232831E-14    2
-5.15019198E+03-1.14509710E+02-1.45131721E+00 9.84852390E-02-7.48332899E-05    3
 2.95583788E-08-4.77739194E+02 4.52143733E+03 3.80998227E+01                   4
bbzoArC    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    41
 2.71674720E+01 2.85658403E-02-9.66303733E-06 1.49114452E-09-8.62116858E-14    2
-1.06051985E+03-1.12055024E+02-2.29294337E+00 9.59637875E-02-6.72219479E-05    3
 2.32495316E-08-3.15187736E-12 9.18218950E+03 4.64561835E+01                   4
bbzoArD    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 2.77307027E+01 2.90539950E-02-9.93451275E-06 1.54299115E-09-8.95755645E-14    2
-7.09326682E+03-1.19107108E+02-1.65297825E+00 9.98247833E-02-7.56681639E-05    3
 2.95616014E-08-4.70510903E-12 2.86856433E+03 3.78999453E+01                   4
bbzoBrA    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.78035861E+01 2.92724310E-02-1.00668507E-05 1.56920034E-09-9.13146378E-14    2
-7.02234433E+03-1.18059965E+02-4.24892477E+00 1.09697278E-01-8.86087740E-05    3
 3.69186975E-08-6.23260013E-12 3.53072779E+03 5.20771152E+01                   4
bbzoBrC    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.78035861E+01 2.92724310E-02-1.00668507E-05 1.56920034E-09-9.13146378E-14    2
-7.02234433E+03-1.18059965E+02-4.24892477E+00 1.09697278E-01-8.86087740E-05    3
 3.69186975E-08-6.23260013E-12 3.53072779E+03 5.20771152E+01                   4
bbzoBrD    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 2.69914481E+01 3.01992500E-02-1.04359777E-05 1.63172923E-09-9.51468482E-14    2
-1.07032218E+04-1.14690142E+02-1.92355476E+00 9.93073335E-02-7.45081539E-05    3
 2.90868467E-08-4.67049841E-12-7.86301828E+02 4.01030977E+01                   4
bbzoCrA    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 2.61954466E+01 3.08243833E-02-1.07338513E-05 1.68675459E-09-9.86948325E-14    2
-2.89659689E+03-1.07193892E+02-4.31196236E+00 1.03866701E-01-7.88348384E-05    3
 3.11398293E-08-5.06578980E-12 7.57818322E+03 5.61191396E+01                   4
bbzoCrB    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.74763258E+01 2.99996223E-02-1.04142719E-05 1.63327064E-09-9.54366848E-14    2
-6.63505766E+03-1.16257195E+02-5.35913574E+00 1.12216376E-01-9.09362477E-05    3
 3.81492938E-08-6.50843036E-12 4.24110764E+03 5.81775158E+01                   4
bbzoCrD    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    21
 2.58019471E+01 3.16459976E-02-1.09375052E-05 1.71026117E-09-9.97291859E-14    2
-1.11778507E+04-1.08184483E+02-2.69835730E+00 9.79814554E-02-7.04795156E-05    3
 2.63353960E-08-4.06345875E-12-1.21141408E+03 4.50427608E+01                   4
bbzoDrA    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.69825346E+01 3.02990870E-02-1.04886310E-05 1.64167111E-09-9.57899953E-14    2
-2.16893026E+03-1.15105971E+02-3.43458327E+00 1.06711118E-01-8.60117704E-05    3
 3.63600071E-08-6.28926580E-12 7.92828537E+03 4.64709175E+01                   4
bbzoDrB    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 2.75234254E+01 2.87179720E-02-9.72128806E-06 1.50077437E-09-8.67921546E-14    2
-3.75433505E+03-1.17202927E+02-3.11331581E+00 1.01798293E-01-7.62747889E-05    3
 2.90399294E-08-4.45684568E-12 6.64476539E+03 4.66544830E+01                   4
bbzoDrC    3/ 5/ 8 ThERMc  10h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 2.82121640E+01 2.95594236E-02-1.02074110E-05 1.59509692E-09-9.29709830E-14    2
-5.89720245E+03-1.23898366E+02-4.33429988E+00 1.14322528E-01-9.70067680E-05    3
 4.27135297E-08-7.59464582E-12 4.57151548E+03 4.78656053E+01                   4
!
! Naphtenes : Cyclohexane and related species
cyc6h12              c   6h  120   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12205880E+02 0.38627610E-01-0.15332710E-04 0.28281620E-08-0.19595770E-12    2
-0.22234460E+05-0.49516510E+02 0.58143660E+00 0.26619460E-01 0.94029460E-04    3
-0.13926450E-06 0.56167110E-10-0.16809450E+05 0.21382790E+02                   4
cyc6h11              c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11953160E+02 0.36054810E-01-0.14270630E-04 0.26289290E-08-0.18202300E-12    2
 0.19723910E+04-0.44623210E+02-0.68057580E+00 0.34365240E-01 0.68779930E-04    3
-0.11316470E-06 0.46884340E-10 0.73025330E+04 0.29643140E+02                   4
cyc6h10              c   6h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12127550E+02 0.31138130E-01-0.11908080E-04 0.21594810E-08-0.14827150E-12    2
-0.70193130E+04-0.44330720E+02-0.65729920E+01 0.77191640E-01-0.42894120E-04    3
-0.23506380E-08 0.79949080E-11-0.15179460E+04 0.53755130E+02                   4
chxone     7/ 6/ 7 TABULc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1365.000    01
 2.01409395E+01 2.57209053E-02-9.15700344E-06 1.46033929E-09-8.63280581E-14    2
-3.90638994E+04-9.21920793E+01-5.98853936E+00 7.52996046E-02-3.92750855E-05    3
 6.51347911E-09 4.09099765E-13-2.89073398E+04 5.21038569E+01                   4
Bchxone    7/ 6/ 7 ThERMGc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1364.000    01
 1.98908674E+01 2.34334138E-02-8.37932221E-06 1.34019256E-09-7.93844189E-14    2
-1.84840669E+04-8.91580154E+01-5.77105040E+00 7.39263584E-02-4.20232218E-05    3
 9.31360769E-09-3.25017007E-13-8.66055028E+03 5.19668439E+01                   4
Cchxone    7/ 6/ 7 ThERMGc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1366.000    01
 2.01006249E+01 2.32378761E-02-8.30777911E-06 1.32857931E-09-7.86895546E-14    2
-1.52900533E+04-9.02146381E+01-5.89294288E+00 7.55823050E-02-4.49454442E-05    3
 1.12086978E-08-7.47338822E-13-5.45460164E+03 5.23168219E+01                   4
Dchxone    7/ 6/ 7 ThERMGc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1366.000    01
 2.01006249E+01 2.32378761E-02-8.30777911E-06 1.32857931E-09-7.86895546E-14    2
-1.48874363E+04-9.02146381E+01-5.89294288E+00 7.55823050E-02-4.49454442E-05    3
 1.12086978E-08-7.47338822E-13-5.05198463E+03 5.23168219E+01                   4
chxe2oA    7/12/ 7 ThERMc   6h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    01
 1.64738671E+01 2.24168067E-02-7.71546903E-06 1.20316552E-09-7.00293157E-14    2
-2.30669479E+04-6.40702200E+01-3.28988705E+00 6.70923487E-02-4.58413121E-05    3
 1.58423330E-08-2.20960812E-12-1.60652763E+04 4.25853946E+01                   4
chxe3oA    1/22/ 8 ThERMc   6h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    01
 1.70075888E+01 2.18039074E-02-7.47148523E-06 1.16190151E-09-6.75044926E-14    2
-2.27054502E+04-6.77186475E+01-3.55106616E+00 6.96785306E-02-4.99515369E-05    3
 1.82788484E-08-2.71432818E-12-1.55774108E+04 4.27046358E+01                   4
Dchxe2oA   7/12/ 7 ThERMc   6h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    01
 1.64620244E+01 2.03223898E-02-7.09138778E-06 1.11601952E-09-6.53713052E-14    2
-6.18497335E+03-6.54615889E+01-3.47263883E+00 6.47073687E-02-4.41084668E-05    3
 1.48780039E-08-1.99321925E-12 9.41297289E+02 4.23513315E+01                   4
chxqjA     4/25/ 6 thermc   6h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    21
 2.23723502e+01 2.76799389e-02-9.74217376e-06 1.54194767e-09-9.06767646e-14    2
-2.25043028e+04-9.84390954e+01-4.91663898e+00 8.36156703e-02-4.98338842e-05    3
 1.27483629e-08-9.18573704e-13-1.23181790e+04 5.07734668e+01                   4
chxqArC    4/25/ 6 thermc   6h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1674.000    31
 2.08646979e+01 2.96341739e-02-1.07902024e-05 1.75531891e-09-1.05423919e-13    2
-1.46988749e+04-8.61399090e+01-5.91891989e+00 8.90964037e-02-5.70299093e-05    3
 1.65056839e-08-1.68121138e-12-5.68907646e+03 5.79514171e+01                   4
chxo-AC    3/17/ 6 thermc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1414.000    11
 1.70432456e+01 2.65572035e-02-9.13811564e-06 1.42504394e-09-8.29535921e-14    2
-1.46768181e+04-8.14912637e+01-1.38437418e+01 9.93621377e-02-7.31516433e-05    3
 2.62404937e-08-3.64205396e-12-4.23721033e+03 8.37877733e+01                   4
chxqAqjC   4/25/ 6 thermc   6h  11o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    41
 2.81643825e+01 2.70787755e-02-9.55221198e-06 1.51423647e-09-8.91457979e-14    2
-3.68750235e+04-1.23417034e+02-3.28956238e+00 9.63507262e-02-6.55056629e-05    3
 2.09993056e-08-2.51428587e-12-2.56520552e+04 4.68029573e+01                   4
chxoAqC    4/25/ 6 thermc   6h  10o   3    0G   300.000  5000.000 1375.000    31
 2.52486424e+01 2.51552832e-02-8.95050866e-06 1.42688704e-09-8.43298127e-14    2
-5.37591287e+04-1.10749938e+02-3.64313819e+00 8.69242507e-02-5.71262338e-05    3
 1.75279949e-08-1.99081312e-12-4.31920585e+04 4.63883591e+01                   4
chxqAqCrE  4/24/ 6 thermc   6h  11o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.98556860e+01 2.53932414e-02-9.01194962e-06 1.43437601e-09-8.46824672e-14    2
-3.09326307e+04-1.30765809e+02-2.43293753e+00 9.54793112e-02-6.38371965e-05    3
 1.93409599e-08-2.03740537e-12-1.93630522e+04 4.42454223e+01                   4
chxoAojC   5/17/ 6 thermc   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1375.000    11
 2.16986711e+01 2.38614849e-02-8.48934175e-06 1.35326438e-09-7.99739026e-14    2
-3.40283733e+04-9.44180650e+01-5.30175565e+00 8.18700956e-02-5.43213955e-05    3
 1.70978267e-08-2.04939471e-12-2.41575982e+04 5.23731039e+01                   4
Fc6oAoC    4/25/ 6 thermc   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.09345242e+01 2.22272474e-02-7.78804733e-06 1.22881339e-09-7.21004849e-14    2
-2.98969519e+04-7.79763209e+01 1.34059685e+00 6.61325844e-02-4.57453535e-05    3
 1.64609501e-08-2.48269478e-12-2.28102712e+04 2.80801305e+01                   4
Fc6oAoE    4/25/ 6 thermc   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1376.000    51
 2.19565890e+01 2.06270189e-02-7.08584744e-06 1.10445464e-09-6.42897368e-14    2
-3.20609587e+04-8.23094000e+01 3.37016319e+00 6.21004146e-02-4.23516457e-05    3
 1.48216677e-08-2.14166376e-12-2.53667477e+04 1.82811880e+01                   4
c6e5oAqC   4/25/ 6 thermc   6h  10o   3    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.43363645e+01 2.32619903e-02-7.97983925e-06 1.24156802e-09-7.21484288e-14    2
-3.80969918e+04-9.26650503e+01 2.80177520e+00 7.56142504e-02-5.75289633e-05    3
 2.29396690e-08-3.76226059e-12-3.08024190e+04 2.22988631e+01                   4
c6e5oAojC  4/25/ 6 thermc   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.09931688e+01 2.15884936e-02-7.34654380e-06 1.13709905e-09-6.58449106e-14    2
-1.84307845e+04-7.74585397e+01 1.07403306e+00 7.07521573e-02-5.47576225e-05    3
 2.23263287e-08-3.74166745e-12-1.17552653e+04 2.86231400e+01                   4
Fc6e1oC    7/ 9/ 7 ThERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.77941790E+01 2.26156567E-02-7.78874031E-06 1.21464807E-09-7.06858222E-14    2
-4.36440894E+03-6.19278418E+01 1.03319911E+00 6.28779629E-02-4.63111058E-05    3
 1.86665103E-08-3.18974731E-12 1.47331193E+03 2.79101393E+01                   4
c6e5oA     7/ 2/ 7 ThERMc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 1.90412958E+01 2.30050599E-02-7.78788634E-06 1.20152256E-09-6.94292715E-14    2
-2.38992530E+04-7.04316129E+01 1.02313160E+00 6.32658964E-02-4.18421805E-05    3
 1.42392074E-08-1.98692545E-12-1.74398700E+04 2.70205947E+01                   4
c6e5oyA    7/ 2/ 7 ThERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    41
 1.86755649E+01 2.07953787E-02-7.03344647E-06 1.08469274E-09-6.26679896E-14    2
-4.95814253E+03-6.68115048E+01 1.79916384E+00 5.84418184E-02-3.87174054E-05    3
 1.31026351E-08-1.80562030E-12 1.08843409E+03 2.44718355E+01                   4
Ac6e5oC    4/25/ 6 thermc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    41
 1.87405515e+01 2.18452388e-02-7.62797487e-06 1.20077764e-09-7.03414372e-14    2
-2.53801504e+03-6.91579149e+01-3.20626235e-02 6.48624436e-02-4.61011686e-05    3
 1.73220569e-08-2.74331879e-12 4.16933620e+03 3.21364174e+01                   4
Ac6e5oB    7/10/ 7 ThERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.90977510E+01 2.13011920E-02-7.29398012E-06 1.13347155E-09-6.58106094E-14    2
-6.16157572E+03-7.00183773E+01 5.31389846E-01 6.62511714E-02-4.98670273E-05    3
 1.98908093E-08-3.28937382E-12 1.73405398E+02 2.92114067E+01                   4
chxoqjB    7/16/ 7 ThERMc   6h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    11
 2.18235167E+01 2.56616429E-02-8.95975046E-06 1.41033097E-09-8.26132434E-14    2
-3.22602094E+04-8.83245153E+01-3.15851706E+00 8.71011955E-02-6.87613885E-05    3
 2.87167486E-08-4.96051992E-12-2.37756626E+04 4.49497736E+01                   4
DchxoqB    7/16/ 7      c   6h   9o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    21
 2.39729354E+01 2.28467144E-02-7.88095416E-06 1.23203014E-09-7.18708768E-14    2
```

```
-2.79008320E+04-9.83092611E+01-3.28086515E+00 8.78250790E-02-6.72609695E-05    3
 2.60092142E-08-4.05656612E-12-1.86211610E+04 4.75102879E+01                    4
chxoqBqjD  7/16/ 7 THERMc   6h   9o   5    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 2.89000837E+01 2.45856350E-02-9.20914362E-06 1.50507849E-09-8.99988833E-14    2
-4.73375682E+04-1.21664520E+02-9.75804263E-01 9.65244107E-02-7.64227176E-05    3
 3.05177822E-08-4.95720951E-12-3.71616178E+04 3.80558046E+01                    4
chxoAoBqD  7/16/ 7 THERMc   6h   8o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 2.37445708E+01 2.37581442E-02-8.33883258E-06 1.31727730E-09-7.73562152E-14    2
-6.11207104E+04-9.41106587E+01 3.33525963E-01 7.76855722E-02-5.62998963E-05    3
 2.10366251E-08-3.24821093E-12-5.28533836E+04 3.19964470E+01                    4
chxoAoBojD 7/16/ 7 THERMc   6h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    01
 2.04114995E+01 2.11392498E-02-7.18458009E-06 1.11213599E-09-6.44361183E-14    2
-4.13288414E+04-7.80755306E+01-7.80081717E-01 6.93584850E-02-4.83591844E-05    3
 1.68045056E-08-2.31969493E-12-3.38994378E+04 3.60980151E+01                    4
c6e5oAoB   7/10/ 7 THERMc   6h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 2.02823179E+01 1.98840364E-02-6.72940195E-06 1.03860888E-09-6.00494085E-14    2
-3.43595857E+04-7.47448330E+01 1.11200047E+00 6.50235386E-02-4.75020525E-05    3
 1.78908046E-08-2.75262547E-12-2.77529740E+04 2.80630682E+01                    4
c6e5oyAoB  7/10/ 7 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 1.97791933E+01 1.79052395E-02-6.07573469E-06 9.39399911E-10-5.43813378E-14    2
-1.53672616E+04-7.03609118E+01 1.89809862E+00 6.02047539E-02-4.44954007E-05    3
 1.69159297E-08-2.62278003E-12-9.22715801E+03 2.54593026E+01                    4
Fc6oAoDoE  7/16/ 7 THERMc   6h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1379.000    41
 2.16746287E+01 1.95197237E-02-6.86394268E-06 1.08559381E-09-6.38027709E-14    2
-4.28217557E+04-7.77055725E+01 4.45428478E+00 5.75707306E-02-3.92835563E-05    3
 1.39389931E-08-2.08471466E-12-3.65205798E+04 1.57267486E+01                    4
Fc6oAoCoD  7/16/ 7 THERMc   6h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    41
 2.03384720E+01 2.05644976E-02-7.20383342E-06 1.13646861E-09-6.66754866E-14    2
-3.85177798E+04-6.83374662E+01 2.77679474E+00 5.87843089E-02-3.87292241E-05    3
 1.30374827E-08-1.81459068E-12-3.20611285E+04 2.71066123E+01                    4
Ac6e3e5oB  1/28/ 8 THERMc   6h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1400.000    01
 1.82512010E+01 1.82389910E-02-6.24175498E-06 9.69260995E-10-5.62383136E-14    2
 4.55626662E+03-6.79199728E+01-1.50621662E+00 7.41455494E-02-6.86556153E-05    3
 3.29106507E-08-6.25875231E-12 1.05113127E+04 3.48448269E+01                    4
chxoAoD    7/11/ 7 THERMc   6h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1378.000    01
 1.85413375E+01 2.26700985E-02-7.69614236E-06 1.18996880E-09-6.88769651E-14    2
-5.09584783E+04-7.28728275E+01 1.33400136E+00 6.10144321E-02-4.05803367E-05    3
 1.42597693E-08-2.11766124E-12-4.47158824E+04 2.03387315E+01                    4
BchxoAoD                 c   6h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.23248880E+01 0.55698313E-01-0.23942686E-04 0.45061199E-08-0.31192125E-12    2
-0.22894023E+05 0.44384457E+02-0.33453507E+01 0.73685326E-01-0.52156713E-04    3
 0.15648114E-07-0.29946651E-12-0.24250383E+05 0.43836452E+02                    4
chxe2oAoD  1/11/ 8 THERMc   6h   6o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    01
 1.93384819E+01 1.79612008E-02-6.29204269E-06 9.92582923E-10-5.82302729E-14    2
-4.30663181E+04-8.99422860E+01 8.35232757E-01 6.63079555E-02-5.71737769E-05    3
 2.61905962E-08-4.89591724E-12-3.69981999E+04 7.87649710E+00                    4
c6e1oCoyF  1/11/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 1.90887192E+01 1.89728030E-02-6.62944641E-06 1.04400580E-09-6.11728695E-14    2
-2.02542956E+04-6.64771350E+01 3.57303474E+00 5.53324226E-02-4.06598933E-05    3
 1.62562625E-08-2.77280792E-12-1.47312189E+04 1.70585776E+01                    4
Echxe2oAoD 1/11/ 8 THERMc   6h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    01
 1.92117334E+01 1.55992165E-02-5.49576527E-06 8.70306046E-10-5.11949245E-14    2
-2.15629486E+04-8.89869770E+01 1.21445215E+00 6.24343546E-02-5.43201345E-05    3
 2.47561348E-08-4.58221340E-12-1.56732454E+04 6.17219538E+00                    4
c6e2e5oyAoD 1/11/8 THERMc   6h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.92055663E+01 1.44370788E-02-5.02195752E-06 7.88550862E-10-4.61127848E-14    2
-1.41670478E+04-7.06791701E+01 7.67365025E-01 6.60681318E-02-6.22040361E-05    3
 2.99165087E-08-5.69252514E-12-8.55038432E+03 2.54267681E+01                    4
ch2coch2hco 4/25/6 thermc   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    31
 1.65293411e+01 1.16224931e-02-4.15199276e-06 6.63671689e-10-3.92958990e-14    2
-2.56430261e+04-5.92508220e+01 4.74484919e-01 4.88653336e-02-3.69861529e-05    3
```

```
 1.37866162e-08-2.05188541e-12-2.00702577e+04 2.70215377e+01                    4
mch                      c   7h  140   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16032843E+02 0.41556634E-01-0.15253654E-04 0.25682432E-08-0.16428485E-12    2
-0.27297383E+05-0.68263153E+02-0.71397581E+01 0.92018709E-01-0.48060268E-04    3
 0.60013181E-08 0.18810118E-11-0.19687607E+05 0.56093052E+02                    4
mchA                     c   7h  130   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18745102E+02 0.33536091E-01-0.11020515E-04 0.17194531E-08-0.10450044E-12    2
-0.37036836E+04-0.80747528E+02-0.81781883E+01 0.10220902E+00-0.78910591E-04    3
 0.35515544E-07-0.77645286E-11 0.45961499E+04 0.61153717E+02                    4
mchB                     c   7h  130   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18226725E+02 0.34001533E-01-0.11181301E-04 0.17445535E-08-0.10598131E-12    2
-0.39044473E+04-0.78063835E+02-0.71604896E+01 0.95285006E-01-0.66128981E-04    3
 0.25637000E-07-0.49542501E-11 0.41534663E+04 0.56743114E+02                    4
mche1                    c   7h  120   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15060380E+02 0.37898161E-01-0.14183903E-04 0.24215905E-08-0.15644849E-12    2
-0.12677504E+05-0.61389572E+02-0.86833000E+01 0.93946613E-01-0.55592787E-04    3
 0.98556558E-08 0.14778843E-11-0.53404697E+04 0.64395348E+02                    4
Amche1                   c   7h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17404659E+02 0.30097608E-01-0.99560420E-05 0.15607695E-08-0.95174194E-13    2
 0.16020061E+05-0.72429604E+02-0.91077747E+01 0.98172247E-01-0.73716918E-04    3
 0.28454494E-07-0.47959102E-11 0.23965514E+05 0.66728203E+02                    4
Cmche1     3/20/ 7 THERMc   7h  11    0    0G   300.000  5000.000 1378.000    01
 2.08937558E+01 2.74310713E-02-9.70142706E-06 1.54045801E-09-9.07925700E-14    2
 1.15029026E-03-9.71642018E+01-8.77423169E+00 8.96244858E-02-5.61260863E-05    3
 1.56648937E-08-1.43269456E-12 1.20774658E+04 6.45525516E+01                    4
Dmche1     2/ 5/ 8 THERMc   7h  11    0    0G   300.000  5000.000 1388.000    01
 1.89910647E+01 2.70108171E-02-9.11391232E-06 1.40324272E-09-8.09787028E-14    2
 9.83849927E+03-7.84430104E+01-5.28663838E+00 8.13076550E-02-5.39191165E-05    3
 1.74857261E-08-2.17512357E-12 1.84051850E+04 5.26248481E+01                    4
BmchohA    2/18/ 8 THERMc   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    21
 2.30657356E+01 3.16877788E-02-1.10160867E-05 1.72963731E-09-1.01158572E-13    2
-2.69546465E+04-1.01741440E+02-6.36697149E+00 9.22113371E-02-5.44269434E-05    3
 1.37857102E-08-9.56604095E-13-1.60138653E+04 5.90798049E+01                    4
mchohAqjB  2/18/ 8 THERMc   7h  13o   3    0G   300.000  5000.000 1365.000    31
 2.93279985E+01 3.22920607E-02-1.15083520E-05 1.83658115E-09-1.08620825E-13    2
-4.51284726E+04-1.22660038E+02-4.17398293E+00 9.71248829E-02-5.30229653E-05    3
 1.04847773E-08-4.60024965E-15-3.22069714E+04 6.19445336E+01                    4
mche13     3/14/ 7 THERMc   7h  10    0    0G   300.000  5000.000 1396.000    01
 1.92923954E+01 2.52588279E-02-8.72529554E-06 1.36374865E-09-7.94957151E-14    2
-1.40142755E+03-8.48317383E+01-7.65649670E+00 9.46461964E-02-7.88950593E-05    3
 3.42080991E-08-6.00970917E-12 7.34446101E+03 5.76699707E+01                    4
mche14     2/ 5/ 8 THERMc   7h  10    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    01
 1.85160986E+01 2.54199118E-02-8.67271533E-06 1.34443981E-09-7.79272189E-14    2
 5.53078090E+02-7.78909006E+01-5.24801330E+00 8.28417557E-02-6.20007584E-05    3
 2.39623331E-08-3.76543318E-12 8.57104575E+03 4.89862816E+01                    4
Emche13    7/20/ 7 THERGc   7h   9    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.17424448E+02 0.23610065E-01-0.74200311E-05 0.11222518E-08-0.66797120E-13    2
 0.12956387E+05-0.71235435E+02-0.64843688E+01 0.87589949E-01-0.63292755E-04    3
 0.16700394E-07 0.14960171E-12 0.19561686E+05 0.52630489E+02                    4
Gmche13    7/20/ 7 THERGc   7h   9    0    0G   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.17424448E+02 0.23610065E-01-0.74200311E-05 0.11222518E-08-0.66797120E-13    2
 0.12956387E+05-0.71235435E+02-0.64843688E+01 0.87589949E-01-0.63292755E-04    3
 0.16700394E-07 0.14960171E-12 0.19561686E+05 0.52630489E+02                    4
Fmche14    2/ 5/ 8 THERMc   7h   9    0    0G   300.000  5000.000 1396.000    01
 1.83539162E+01 2.36016731E-02-8.17488029E-06 1.28007997E-09-7.47160506E-14    2
 1.74763765E+04-7.84727554E+01-5.32098299E+00 8.00106181E-02-5.97838808E-05    3
 2.28561093E-08-3.54874553E+02 2.55607220E+04 4.82394856E+01                    4
Gmche14    2/ 5/ 8 THERMc   7h   9    0    0G   300.000  5000.000 1396.000    01
 1.83539162E+01 2.36016731E-02-8.17488029E-06 1.28007997E-09-7.47160506E-14    2
 1.74763765E+04-7.84727554E+01-5.32098299E+00 8.00106181E-02-5.97838808E-05    3
 2.28561093E-08-3.54874553E+02 2.55607220E+04 4.82394856E+01                    4
```

```
mche135    7/20/ 7 THERMc   7h   8    0    0G   300.000  5000.000 1418.000    01
 1.71441511E+01 2.18499669E-02-6.98272820E-06 1.03477475E-09-5.80967365E-14    2
 1.38823407E+04-7.05415464E+01-5.75031772E+00 8.58740562E-02-7.56844131E-05    3
 3.42813307E-08-6.12890820E-12 2.06302761E+04 4.84260699E+01                    4
mche136    7/20/ 7 THERMc   7h   8    0    0G   300.000  5000.000 1399.000    01
 1.93748752E+01 2.01709440E-02-6.98618632E-06 1.09383848E-09-6.38390397E-14    2
 9.53227711E+03-8.67978202E+01-6.76823744E+00 9.28079751E-02-8.63020762E-05    3
 4.08136313E-08-7.63343907E-12 1.74912819E+04 4.95660385E+01                    4
mche1oC    3/12/ 7 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000     1
 2.12266028E+01 2.69354925E-02-9.48198345E-06 1.50104169E-09-8.82850220E-14    2
-2.90100485E+04-9.32089092E+01-6.25268908E+00 8.61997765E-02-5.66985338E-05    3
 1.79731007E-08-2.20422220E-12-1.89741984E+04 5.61253990E+01                    4
mchoA      7/ 6/ 7 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    11
 2.30009183E+01 3.00552736E-02-1.05494953E-05 1.66687207E-09-9.79116854E-14    2
-4.06676816E+04-1.04625426E+02-7.78291291E+00 9.37105260E-02-5.65220116E-05    3
 1.45676146E-08-1.03941037E-12-2.92799844E+04 6.34197748E+01                    4
mche2oA    3/13/ 7 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    11
 2.36989595E+01 2.42253466E-02-8.51470184E-06 1.34735365E-09-7.92478352E-14    2
-2.97147442E+04-1.09141641E+02-8.62093627E+00 9.69585025E-02-6.89304932E-05    3
 2.32079670E-08-2.95974349E-12-1.83814837E+04 6.51434355E+01                    4
chxco      7/ 6/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    11
 2.25831804E+01 2.79290640E-02-9.83082645E-06 1.55622524E-09-9.15308749E-14    2
-2.17061664E+04-1.00713539E+02-6.99164752E+00 8.88386593E-02-5.33691514E-05    3
 1.34458526E-08-8.66947195E-13-1.07543713E+04 6.07971099E+01                    4
mche2oya   3/13/ 7 THERMc   7h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    11
 2.33432399E+01 2.20160532E-02-7.76246818E-06 1.23109129E-09-7.25288255E-14    2
-1.07814604E+04-1.05587926E+02-7.84896976E+00 9.21365945E-02-6.57792181E-05    3
 2.20482092E-08-2.77311557E-12 1.47745291E+02 6.26162107E+01                    4
mchoAoC    1/17/ 8 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    11
 2.19070574E+01 2.80124500E-02-9.74361164E-06 1.52994312E-09-8.94693079E-14    2
-5.24416492E+04-9.11483642E+01-4.37728117E+00 8.89901239E-02-6.40754185E-05    3
 2.37322101E-08-3.60606684E-12-4.32466025E+04 5.02074849E+01                    4
mchoyAoC   1/17/ 8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    11
 2.15070634E+01 2.58487304E-02-9.00720569E-06 1.41604131E-09-8.28797156E-14    2
-3.34863262E+04-8.73354321E+01-3.67182353E+00 8.44457280E-02-6.13542400E-05    3
 2.28424822E-08-3.47821789E-12-2.47065844E+04 4.79933076E+01                    4
mchoAoD    7/ 9/ 7 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1688.000    11
 2.35117587E+01 2.70890488E-02-1.02301390E-05 1.70186146E-09-1.03717705E-13    2
-5.33262218E+04-1.02188840E+02-7.68343033E+00 9.85291164E-02-6.86461525E-05    3
 2.19465656E-08-2.60641551E-12-4.30239003E+04 6.48875488E+01                    4
mchoyAoD   7/ 9/ 7 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1688.000    11
 2.38600844E+01 2.39950114E-02-9.09612808E-06 1.51697717E-09-9.26089595E-14    2
-3.46361906E+04-1.02558478E+02-7.96945211E+00 9.92763763E-02-7.34113318E-05    3
 2.51794491E-08-3.27020468E-12-2.43651022E+04 6.70426007E+01                    4
AmchoD     1/18/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    11
 2.12535448E+01 2.73963116E-02-9.29219857E-06 1.43613335E-09-8.31087693E-14    2
-1.77976405E+04-8.81289845E+01-3.60285612E+00 8.45280992E-02-5.93833906E-05    3
 2.14533487E-08-3.17124274E-12-9.07375285E+03 4.56981571E+01                    4
AmchoC     7/10/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    11
 2.22932995E+01 2.80990410E-02-9.87340107E-06 1.56126093E-09-9.17608793E-14    2
-1.94231512E+04-9.75772226E+01-7.26226258E+00 9.04985130E-02-5.71089828E-05    3
 1.63582268E-08-1.60431609E-12-8.57589316E+03 6.33800919E+01                    4
Ec5oA                    c   5h   9o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.72201772E+01 0.32553285E-01-0.11141595E-04 0.17868643E-08-0.11056394E-12    2
-0.64682900E+04-0.31016388E+01-0.12005811E+00 0.66404425E-01-0.62320956E-04    3
 0.34077246E-07-0.77417638E-11-0.55401924E+04 0.30485794E+02                    4
Gc7h13-1   2/ 6/ 8 THERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.06754243E+01 2.89092236E-02-9.83222685E-06 1.52079763E-09-8.80072255E-14    2
 6.73955059E+03-7.86619546E+01-8.56743712E-01 7.77195832E-02-5.19282134E-05    3
 1.80146398E-08-2.57342002E-12 1.43869941E+04 3.75421714E+01                    4
c7e6oyA    7/ 6/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
```

```
 2.16749333E+01 2.55539561E-02-8.68940781E-06 1.34434064E-09-7.78233167E-14    2
-8.98788906E+03-8.14498680E+01 1.55446095E+00 7.07896772E-02-4.73250551E-05    3
 1.63377571E-08-2.32059757E-12-1.79866065E+03 2.72803735E+01                    4
Gc7e1oC    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.08581715E+01 2.71260132E-02-9.32167756E-06 1.45159972E-09-8.43903625E-14    2
-8.64595388E+03-7.66423925E+01 1.13906035E+00 7.36985646E-02-5.27911191E-05    3
 2.05831971E-08-3.40871501E-12-1.71838914E+03 2.92994937E+01                    4
Ec5e1oC    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 1.50209877E+01 1.75442952E-02-6.08801290E-06 9.54283638E-10-5.57335246E-14    2
-7.01603605E+02-4.83943645E+01 1.66866314E+00 4.86967704E-02-3.49582461E-05    3
 1.36714802E-08-2.28458297E-12 4.05279149E+03 2.35209132E+01                    4
Ac7e6oB    1/18/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.22184015E+01 2.58711194E-02-8.87053128E-06 1.37957419E-09-8.01409740E-14    2
-1.02427146E+04-8.53427558E+01 3.39466946E-01 7.83229157E-02-5.79866787E-05    3
 2.27700327E-08-3.71759514E-12-2.72080235E+03 3.17828320E+01                    4
Gc7e1oD    1/18/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.09214488E+01 2.68741220E-02-9.28623780E-06 1.45153214E-09-8.46108622E-14    2
-6.11188724E+03-7.60981314E+01 2.25469174E-01 7.50916821E-02-5.34508397E-05    3
 2.04818503E-08-3.32658285E-12 1.21573324E+03 3.53122182E+01                    4
Ac5e4oB    7/10/ 7 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 1.59291526E+01 1.70758675E-02-5.90082483E-06 9.22507044E-10-5.37832664E-14    2
-1.66814869E+03-5.47187267E+01-6.01898874E+01 5.77682854E-02-4.50545922E-05    3
 1.83896040E-08-3.07933583E+02 3.88844134E+03 3.33664561E+01                    4
Gc7e1oF    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.25662917E+01 2.55408224E-02-8.84207267E-06 1.38397444E-09-8.07531335E-14    2
-1.04435430E+04-8.74371705E+01 5.37966984E-01 7.73369396E-02-5.63503232E-05    3
 2.16863141E-08-3.48297407E-12-2.74858782E+03 3.08822076E+01                    4
ech                      c   8h  160   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16793823E+02 0.49777281E-01-0.18447010E-04 0.31287934E-08-0.20127181E-12    2
-0.30306131E+05-0.69607750E+02-0.78381824E+01 0.10686623E+00-0.58971611E-04    3
 0.88880414E-08 0.20630459E-11-0.22603070E+05 0.61231651E+02                    4
echA                     c   8h  15    0    0G   300.00   5000.00   1000.00     1
 0.19793590E+02 0.41191800E-01-0.13851200E-04 0.21924740E-08-0.13436080E-12    2
-0.68495640E+04-0.83545700E+02-0.87674160E+01 0.11630430E+00-0.88027770E-04    3
 0.36623820E-07-0.69571410E-11 0.16374580E+04 0.65951150E+02                    4
eche1                    c   8h  140   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18143300E+02 0.44632620E-01-0.17021500E-04 0.29459110E-08-0.19221280E-12    2
-0.15231210E+05-0.77140530E+02-0.60180530E+01 0.98384120E-01-0.52772570E-04    3
 0.66304260E-08 0.22392020E-11-0.74359980E+04 0.52048200E+02                    4
Aeche1                   c   8h  130   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20777645E+02 0.36194086E-01-0.12358416E-04 0.19776736E-08-0.12213041E-12    2
 0.13717352E+05-0.89718239E+02-0.62715268E+01 0.10174156E+00-0.69496098E-04    3
 0.24277881E-07-0.38001013E-11 0.22199223E+05 0.53638279E+02                    4
Ceche1     3/20/ 7 THERMc   8h  13    0    0G   300.000  5000.000 1378.000    11
 2.34879070E+01 3.24267096E-02-1.14206708E-05 1.80844708E-09-1.06383079E-13    2
-3.25081047E+03-1.10214928E+02-8.58360018E+00 9.74239297E-02-5.68522186E-05    3
 1.37268858E-08-7.75379706E-13 8.78002805E+03 6.53863854E+01                    4
eche1e3    3/14/ 7 THERMc   8h  12    0    0G   300.000  5000.000 1397.000    11
 2.24266330E+01 2.97553884E-02-1.02632346E-05 1.60246689E-09-9.33420445E-14    2
-5.47105093E+03-1.00195433E+02-7.82894262E+00 1.06591027E-01-8.67362697E-05    3
 3.68258201E-08-6.36067560E-12 4.44810741E+03 6.01580452E+01                    4
eche2oA                  c   8h  12o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.43812938E+01 0.69057718E-01-0.30892988E-04 0.59814003E-08-0.42263198E-12    2
-0.24084113E+05 0.17476349E+01-0.92768393E+01 0.10433583E+00-0.59713402E-04    3
 0.11507266E-07 0.11003039E-11-0.20144287E+05 0.73004089E+02                    4
echoA      7/ 6/ 7 THERMc   8h  14o   1    0G   300.000  5000.000 1369.000    21
 2.68551323E+01 3.30879115E-02-1.14141643E-05 1.78451208E-09-1.04108063E-13    2
-4.50931556E+04-1.23715917E+02-6.85753812E+00 1.02752556E-01-6.15729153E-05    3
 1.57487894E-08-1.09525079E-12-3.26331230E+04 6.03108464E+01                    4
echoyA     7/ 6/ 7 THERMc   8h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1368.000    21
 2.63876115E+01 3.10624299E-02-1.07416862E-05 1.68215415E-09-9.82500991E-14    2
```

```
-2.61172258E+04-1.19538117E+02-6.07462026E+00 9.79246864E-02-5.85062014E-05    3
 1.47128220E-08-9.48434108E-13-1.41063729E+04 5.77257461E+01                   4
AechoB      7/ 6/ 7 THERMc   8h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    21
 2.71312109E+01 3.15488431E-02-1.11399882E-05 1.76706182E-09-1.04075421E-13    2
-2.74228044E+04-1.24972513E+02-8.36535798E+00 1.07892603E-01-7.05027324E-05    3
 2.11685434E-08-2.25412046E-12-1.45677536E+04 6.77860255E+01                   4
AechoE      1/18/ 8 THERMc   8h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    21
 2.44455673E+01 3.18187693E-02-1.07986097E-05 1.66928525E-09-9.66043783E-14    2
-2.18948244E+04-1.03829892E+02-3.91069248E+00 9.70806258E-02-6.81264766E-05    3
 2.46313543E-08-3.64758870E-12-1.19498300E+04 4.88118304E+01                   4
eche1oE     1/25/ 8 THERMc   8h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    11
 2.37156302E+01 3.02780430E-02-1.02598619E-05 1.58450345E-09-9.16420462E-14    2
-3.08640689E+04-1.02296953E+02-5.08929091E+00 9.88733966E-02-7.32504548E-05    3
 2.81693175E-08-4.43961119E-12-2.10003074E+04 5.19293489E+01                   4
AechoD      7/11/7 THERMc   8h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    21
 2.54222225E+01 3.26665442E-02-1.14503794E-05 1.80758009E-09-1.06110460E-13    2
-2.35100750E+04-1.12954332E+02-7.45620128E+00 1.02579077E-01-6.52347179E-05    3
 1.92423668E-08-2.03442301E-12-1.14698470E+04 6.59606034E+01                   4
echoAoD     7/10/ 7 THERMc   8h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1376.000    21
 2.66419204E+01 3.17334170E-02-1.11522861E-05 1.76360895E-09-1.03656249E-13    2
-5.81126239E+04-1.18525141E+02-5.76107057E+00 1.00316704E-01-6.36794897E-05    3
 1.87372475E-08-1.98249798E-12-4.61954637E+04 5.79489327E+01                   4
echoyAoD    7/10/ 7 THERMc   8h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1375.000    21
 2.62205403E+01 2.96136663E-02-1.04364894E-05 1.65346981E-09-9.73071644E-14    2
-3.91501428E+04-1.14594011E+02-4.99237945E+00 9.55464584E-02-6.06849125E-05    3
 1.77182547E-08-1.83355695E-12-2.76664303E+04 5.54307623E+01                   4
! Naphtenes : Propylcyclohexane
pch         9/ 1/ 8 THERMc   9h  18    0    0G   300.000  5000.000 1384.000    31
 2.84730177E+01 4.19125067E-02-1.45352203E-05 2.27831725E-09-1.33086957E-13    2
-3.93812957E+04-1.35369227E+02-9.38577691E+00 1.21387672E-01-7.40463429E-05    3
 2.04933154E-08-1.88604607E-12-2.54398188E+04 7.09671283E+01                   4
pchA        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 2.80463275E+01 3.97795938E-02-1.38109077E-05 2.16642959E-09-1.26618935E-13    2
-1.43116245E+04-1.30622930E+02-8.61025231E+00 1.16809198E-01-7.15343175E-05    3
 1.98376651E-08-1.82505547E-12-8.28177395E+02 6.91211322E+01                   4
pchB        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.78484459E+01 3.95365515E-02-1.36449677E-05 2.13266067E-09-1.24355437E-13    2
-1.56682807E+04-1.28701576E+02-8.16097495E+00 1.11675792E-01-6.23659891E-05    3
 1.36019166E-08-3.71583049E-13-2.13699916E+03 6.86575591E+01                   4
pchC        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.78484459E+01 3.95365515E-02-1.36449677E-05 2.13266067E-09-1.24355437E-13    2
-1.56682807E+04-1.28701576E+02-8.16097495E+00 1.11675792E-01-6.23659891E-05    3
 1.36019166E-08-3.71583049E-13-2.13699916E+03 6.86575591E+01                   4
pchD        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 2.77461334E+01 4.00281069E-02-1.38948501E-05 2.17931818E-09-1.27359816E-13    2
-1.65772630E+04-1.28565628E+02-7.37386405E+00 1.11721720E-01-6.48626198E-05    3
 1.61499389E-08-1.08431459E-12-3.43839209E+03 6.35696735E+01                   4
pchE        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.78484459E+01 3.95365515E-02-1.36449677E-05 2.13266067E-09-1.24355437E-13    2
-1.56682807E+04-1.29803740E+02-8.16097495E+00 1.11675792E-01-6.23659891E-05    3
 1.36019166E-08-3.71583049E-13-2.13699916E+03 6.75553950E+01                   4
pchF        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.78484459E+01 3.95365515E-02-1.36449677E-05 2.13266067E-09-1.24355437E-13    2
-1.56682807E+04-1.29803740E+02-8.16097495E+00 1.11675792E-01-6.23659891E-05    3
 1.36019166E-08-3.71583049E-13-2.13699916E+03 6.75553950E+01                   4
pchG        9/ 1/ 8 THERMc   9h  17    0    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.78484459E+01 3.95365515E-02-1.36449677E-05 2.13266067E-09-1.24355437E-13    2
-1.56682807E+04-1.29803740E+02-8.16097495E+00 1.11675792E-01-6.23659891E-05    3
 1.36019166E-08-3.71583049E-13-2.13699916E+03 6.75553950E+01                   4
pchqjA      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.16230280E+01 4.19371903E-02-1.46695758E-05 2.31225430E-09-1.35583151E-13    2
-3.24177914E+04-1.44309931E+02-6.95406707E+00 1.24701375E-01-8.00365931E-05    3
 2.47724958E-08-2.94333193E-12-1.82802356E+04 6.54941830E+01                   4
pchqjB      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 3.21830934E+01 4.15168096E-02-1.45363719E-05 2.29265683E-09-1.34489280E-13    2
-3.47619868E+04-1.47295114E+02-7.15229081E+00 1.27490107E-01-8.44511090E-05    3
 2.74219639E-08-3.50112633E-12-2.05103517E+04 6.60616488E+01                   4
pchqjC      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 3.21830934E+01 4.15168096E-02-1.45363719E-05 2.29265683E-09-1.34489280E-13    2
-3.47619868E+04-1.47295114E+02-7.15229081E+00 1.27490107E-01-8.44511090E-05    3
 2.74219639E-08-3.50112633E-12-2.05103517E+04 6.60616488E+01                   4
pchqjD      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    41
 3.23447357E+01 4.13877828E-02-1.44939165E-05 2.28626131E-09-1.34126808E-13    2
-3.60115987E+04-1.48679036E+02-7.02715920E+00 1.28010595E-01-8.58610096E-05    3
 2.85254752E-08-3.77924354E-12-2.17833360E+04 6.47084816E+01                   4
pchqjE      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 3.21830934E+01 4.15168096E-02-1.45363719E-05 2.29265683E-09-1.34489280E-13    2
-3.47619868E+04-1.47295114E+02-7.15229081E+00 1.27490107E-01-8.44511090E-05    3
 2.74219639E-08-3.50112633E-12-2.05103517E+04 6.60616488E+01                   4
pchqjF      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 3.21830934E+01 4.15168096E-02-1.45363719E-05 2.29265683E-09-1.34489280E-13    2
-3.47619868E+04-1.47295114E+02-7.15229081E+00 1.27490107E-01-8.44511090E-05    3
 2.74219639E-08-3.50112633E-12-2.05103517E+04 6.60616488E+01                   4
pchqjG      3/13/ 7 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    41
 3.21830934E+01 4.15168096E-02-1.45363719E-05 2.29265683E-09-1.34489280E-13    2
-3.47619868E+04-1.47295114E+02-7.15229081E+00 1.27490107E-01-8.44511090E-05    3
 2.74219639E-08-3.50112633E-12-2.05103517E+04 6.60616488E+01                   4
pchqA       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.40827737E+01 4.20979113E-02-1.47553153E-05 2.32897814E-09-1.36697960E-13    2
-5.16892788E+04-1.59279882E+02-7.93578250E+00 1.33612439E-01-8.83179908E-05    3
 2.81277767E-08-3.44103781E-12-3.64849290E+04 6.86594700E+01                   4
pchqB       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.46412689E+01 4.16940748E-02-1.46311791E-05 2.31114561E-09-1.35720978E-13    2
-5.40381707E+04-1.62268796E+02-8.16195742E+00 1.36500216E-01-9.28633565E-05    3
 3.08619818E-08-4.01924996E-12-3.87101155E+04 6.93617676E+01                   4
pchqC       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.46412689E+01 4.16940748E-02-1.46311791E-05 2.31114561E-09-1.35720978E-13    2
-5.40381707E+04-1.62268796E+02-8.16195742E+00 1.36500216E-01-9.28633565E-05    3
 3.08619818E-08-4.01924996E-12-3.87101155E+04 6.93617676E+01                   4
pchqD       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 3.48078122E+01 4.15253020E-02-1.45670855E-05 2.30054269E-09-1.35079824E-13    2
-5.52688751E+04-1.63633655E+02-8.09118304E+00 1.37530185E-01-9.52633643E-05    3
 3.26454275E-08-4.45425231E-12-3.99820601E+04 6.82047142E+01                   4
pchqE       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.46412689E+01 4.16940748E-02-1.46311791E-05 2.31114561E-09-1.35720978E-13    2
-5.40381707E+04-1.62268796E+02-8.16195742E+00 1.36500216E-01-9.28633565E-05    3
 3.08619818E-08-4.01924996E-12-3.87101155E+04 6.93617676E+01                   4
pchqF       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.46412689E+01 4.16940748E-02-1.46311791E-05 2.31114561E-09-1.35720978E-13    2
-5.40381707E+04-1.62268796E+02-8.16195742E+00 1.36500216E-01-9.28633565E-05    3
 3.08619818E-08-4.01924996E-12-3.87101155E+04 6.93617676E+01                   4
pchqG       3/13/7 THERMc   9h  18o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.46412689E+01 4.16940748E-02-1.46311791E-05 2.31114561E-09-1.35720978E-13    2
-5.40381707E+04-1.62268796E+02-8.16195742E+00 1.36500216E-01-9.28633565E-05    3
 3.08619818E-08-4.01924996E-12-3.87101155E+04 6.93617676E+01                   4
pchojA      3/12/ 7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    31
 3.02228506E+01 4.03939041E-02-1.40063660E-05 2.19541376E-09-1.28250730E-13    2
-3.17203484E+04-1.40352554E+02-8.87316680E+00 1.24599121E-01-7.97599850E-05    3
 2.38878528E-08-2.58191932E-12-1.75584290E+04 7.19343573E+01                   4
pchojB      3/12/ 7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 3.05689868E+01 4.02668185E-02-1.39960773E-05 2.19703742E-09-1.28467719E-13    2
-3.39696486E+04-1.42105284E+02-9.20969674E+00 1.28280779E-01-8.59718784E-05    3
```

```
 2.78885606E-08-3.47506711E-12-1.97736290E+04 7.30922227E+01                   4
pchojC      3/12/ 7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 3.05689868E+01 4.02668185E-02-1.39960773E-05 2.19703742E-09-1.28467719E-13    2
-3.39696486E+04-1.42105284E+02-9.20969674E+00 1.28280779E-01-8.59718784E-05    3
 2.78885606E-08-3.47506711E-12-1.97736290E+04 7.30922227E+01                   4
pchojD      3/12/ 7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 3.07798453E+01 4.01027379E-02-1.39435456E-05 2.18931977E-09-1.28039675E-13    2
-3.52447749E+04-1.43781368E+02-8.90496670E+00 1.28019831E-01-8.61595162E-05    3
 2.82196771E-08-3.58264789E-12-2.10747809E+04 7.09009225E+01                   4
pchojE      3/12/ 7      c   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 3.05689868E+01 4.02668185E-02-1.39960773E-05 2.19703742E-09-1.28467719E-13    2
-3.39696486E+04-1.42105284E+02-9.20969674E+00 1.28280779E-01-8.59718784E-05    3
 2.78885606E-08-3.47506711E-12-1.97736290E+04 7.30922227E+01                   4
pchojF      3/12/ 7      c   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 3.05689868E+01 4.02668185E-02-1.39960773E-05 2.19703742E-09-1.28467719E-13    2
-3.39696486E+04-1.42105284E+02-9.20969674E+00 1.28280779E-01-8.59718784E-05    3
 2.78885606E-08-3.47506711E-12-1.97736290E+04 7.30922227E+01                   4
pchojG      3/12/ 7      c   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 3.05689868E+01 4.02668185E-02-1.39960773E-05 2.19703742E-09-1.28467719E-13    2
-3.39696486E+04-1.42105284E+02-9.20969674E+00 1.28280779E-01-8.59718784E-05    3
 2.78885606E-08-3.47506711E-12-1.97736290E+04 7.30922227E+01                   4
ApchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.36062095E+01 4.00054735E-02-1.40443926E-05 2.21910757E-09-1.30343987E-13    2
-2.90906726E+04-1.53453002E+02-5.59210082E+00 1.23528897E-01-7.88359011E-05    3
 2.36536001E-08-2.61410062E-12-1.47172295E+04 5.98514671E+01                   4
BpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.36753248E+01 3.99410156E-02-1.40212367E-05 2.21542584E-09-1.30127809E-13    2
-2.66189274E+04-1.54546979E+02-6.95664507E+00 1.28293177E-01-8.48032978E-05    3
 2.68868016E-08-3.25634553E-12-1.19088293E+04 6.59100883E+01                   4
CpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.35726224E+01 3.94812175E-02-1.37486719E-05 2.16156643E-09-1.26551239E-13    2
-2.79887508E+04-1.53200190E+02-6.93045979E+00 1.24681371E-01-7.73480573E-05    3
 2.13556502E-08-1.88994598E-12-1.31453528E+04 6.73980559E+01                   4
DpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1375.000    51
 3.33710181E+01 4.02033739E-02-1.41122891E-05 2.22967071E-09-1.30957737E-13    2
-2.88968108E+04-1.52574342E+02-5.88775269E+00 1.23719540E-01-7.87203493E-05    3
 2.35016299E-08-2.57380255E-12-1.44873126E+04 6.11078710E+01                   4
EpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.35726224E+01 3.94812175E-02-1.37486719E-05 2.16156643E-09-1.26551239E-13    2
-2.79887508E+04-1.53200190E+02-6.93045979E+00 1.24681371E-01-7.73480573E-05    3
 2.13556502E-08-1.88994598E-12-1.31453528E+04 6.73980559E+01                   4
FpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.35726224E+01 3.94812175E-02-1.37486719E-05 2.16156643E-09-1.26551239E-13    2
-2.79887508E+04-1.53200190E+02-6.93045979E+00 1.24681371E-01-7.73480573E-05    3
 2.13556502E-08-1.88994598E-12-1.31453528E+04 6.73980559E+01                   4
GpchqA      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.35726224E+01 3.94812175E-02-1.37486719E-05 2.16156643E-09-1.26551239E-13    2
-2.79887508E+04-1.53200190E+02-6.93045979E+00 1.24681371E-01-7.73480573E-05    3
 2.13556502E-08-1.88994598E-12-1.31453528E+04 6.73980559E+01                   4
ApchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42575847E+01 3.95051040E-02-1.38834568E-05 2.19519910E-09-1.29000849E-13    2
-2.89732436E+04-1.57679532E+02-7.27119558E+00 1.31617958E-01-8.99972875E-05    3
 3.00077251E-08-3.91622623E-12-1.41220851E+04 6.69960979E+01                   4
BpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.32178361E+01 4.03491132E-02-1.41647325E-05 2.23797857E-09-1.31443080E-13    2
-3.22773892E+04-1.49883552E+02-4.73746547E+00 1.20713786E-01-7.61106277E-05    3
 2.26116304E-08-2.48169920E-12-1.82761436E+04 5.68919266E+01                   4
CpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 2.98603117E-08-3.88992551E-12-1.41305643E+04 6.67458861E+01                   4
```

```
DpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.39362487E+01 3.97732020E-02-1.39745682E-05 2.20925389E-09-1.29811671E-13    2
-3.12416491E+04-1.55586270E+02-6.17206954E+00 1.26922222E-01-8.37845423E-05    3
 2.65640204E-08-3.22393074E-12-1.67051913E+04 6.20678521E+01                   4
EpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
FpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
GpchqB      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
ApchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42364091E+01 3.95250966E-02-1.38908291E-05 2.19640198E-09-1.29073079E-13    2
-2.89762145E+04-1.57643874E+02-7.40730066E+00 1.32001449E-01-9.04410599E-05    3
 3.02414833E-08-3.96231768E-12-1.40950698E+04 6.76145893E+01                   4
BpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 2.98603117E-08-3.88992551E-12-1.41305643E+04 6.67458861E+01                   4
CpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.32178361E+01 4.03491132E-02-1.41647325E-05 2.23797857E-09-1.31443080E-13    2
-3.22773892E+04-1.49883552E+02-4.73746547E+00 1.20713786E-01-7.61106277E-05    3
 2.26116304E-08-2.48169920E-12-1.82761436E+04 5.68919266E+01                   4
DpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.39362487E+01 3.97732020E-02-1.39745682E-05 2.20925389E-09-1.29811671E-13    2
-3.12416491E+04-1.55586270E+02-6.17206954E+00 1.26922222E-01-8.37845423E-05    3
 2.65640204E-08-3.22393074E-12-1.67051913E+04 6.20678521E+01                   4
EpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
FpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
GpchqC      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
ApchqD      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 3.44001765E+01 3.93715903E-02-1.38348269E-05 2.18735378E-09-1.28534170E-13    2
-3.02093559E+04-1.59001338E+02-7.31445512E+00 1.32914612E-01-9.26481534E-05    3
 3.19053106E-08-4.37176465E-12-1.53698834E+04 6.63590408E+01                   4
BpchqD      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40573899E+01 3.92895799E-02-1.37272385E-05 2.16256090E-09-1.26775088E-13    2
-3.14819269E+04-1.56215031E+02-6.98425007E+00 1.28258850E-01-8.40995448E-05    3
 2.59694666E-08-2.96299850E-12-1.66595299E+04 6.64564675E+01                   4
CpchqD      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.43938147E+01 3.93700434E-02-1.38327209E-05 2.18685855E-09-1.28498511E-13    2
-3.01950173E+04-1.58860515E+02-7.10374501E+00 1.32171435E-01-9.17031943E-05    3
 3.13814122E-08-4.26511996E-12-1.54070383E+04 6.54179861E+01                   4
EpchqD      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.43938147E+01 3.93700434E-02-1.38327209E-05 2.18685855E-09-1.28498511E-13    2
-3.01950173E+04-1.58860515E+02-7.10374501E+00 1.32171435E-01-9.17031943E-05    3
 3.13814122E-08-4.26511996E-12-1.54070383E+04 6.54179861E+01                   4
FpchqD      03/07 THERMc   9h  17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
```

```
 3.40573899E+01 3.92895799E-02-1.37272385E-05 2.16256090E-09-1.26775088E-13    2
-3.14819269E+04-1.56215031E+02-6.98425007E+00 1.28258850E-01-8.40995448E-05    3
 2.59694666E-08-2.96299850E-12-1.66595299E+04 6.64564675E+01                   4
GpchqD       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40573899E+01 3.92895799E-02-1.37272385E-05 2.16256090E-09-1.26775088E-13    2
-3.14819269E+04-1.56215031E+02-6.98425007E+00 1.28258850E-01-8.40995448E-05    3
 2.59694666E-08-2.96299850E-12-1.66595299E+04 6.64564675E+01                   4
ApchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42364091E+01 3.95250966E-02-1.38908291E-05 2.19640198E-09-1.29073079E-13    2
-2.89762145E+04-1.57643874E+02-7.40730066E+00 1.32001449E-01-9.04410599E-05    3
 3.02414833E-08-3.96231768E-12-1.40950698E+04 6.76145893E+01                   4
BpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
CpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
DpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.39362487E+01 3.97732020E-02-1.39745682E-05 2.20925389E-09-1.29811671E-13    2
-3.12416491E+04-1.55586270E+02-6.17206954E+00 1.26922222E-01-8.37845423E-05    3
 2.65640204E-08-3.22393074E-12-1.67051913E+04 6.20678521E+01                   4
EpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.32178361E+01 4.03491132E-02-1.41647325E-05 2.23797857E-09-1.31443080E-13    2
-3.22773892E+04-1.49883552E+02-4.73746547E+00 1.20713786E-01-7.61106277E-05    3
 2.26116304E-08-2.48169920E-12-1.82761436E+04 5.68919266E+01                   4
FpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 2.98603117E-08-3.88992551E-12-1.41305643E+04 6.67458861E+01                   4
GpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
HpchqE    6/29/ 7 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
ApchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42364091E+01 3.95250966E-02-1.38908291E-05 2.19640198E-09-1.29073079E-13    2
-2.89762145E+04-1.57643874E+02-7.40730066E+00 1.32001449E-01-9.04410599E-05    3
 3.02414833E-08-3.96231768E-12-1.40950698E+04 6.76145893E+01                   4
BpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
CpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
DpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.39362487E+01 3.97732020E-02-1.39745682E-05 2.20925389E-09-1.29811671E-13    2
-3.12416491E+04-1.55586270E+02-6.17206954E+00 1.26922222E-01-8.37845423E-05    3
 2.65640204E-08-3.22393074E-12-1.67051913E+04 6.20678521E+01                   4
EpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 2.98603117E-08-3.88992551E-12-1.41305643E+04 6.67458861E+01                   4
FpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.32178361E+01 4.03491132E-02-1.41647325E-05 2.23797857E-09-1.31443080E-13    2
```

```
-3.22773892E+04-1.49883552E+02-4.73746547E+00 1.20713786E-01-7.61106277E-05    3
 2.26116304E-08-2.48169920E-12-1.82761436E+04 5.68919266E+01                   4
GpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 3.02414833E-08-3.96231768E-12-1.40950698E+04 6.76145893E+01                   4
BpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
CpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
DpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.39362487E+01 3.97732020E-02-1.39745682E-05 2.20925389E-09-1.29811671E-13    2
-3.12416491E+04-1.55586270E+02-6.17206954E+00 1.26922222E-01-8.37845423E-05    3
 2.65640204E-08-3.22393074E-12-1.67051913E+04 6.20678521E+01                   4
EpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
FpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.42269217E+01 3.95315783E-02-1.38926536E-05 2.19663889E-09-1.29084773E-13    2
-2.89601492E+04-1.57484641E+02-7.21379935E+00 1.31370730E-01-8.96991607E-05    3
 2.98603117E-08-3.88992551E-12-1.41305643E+04 6.67458861E+01                   4
GpchqG       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.32178361E+01 4.03491132E-02-1.41647325E-05 2.23797857E-09-1.31443080E-13    2
-3.22773892E+04-1.49883552E+02-4.73746547E+00 1.20713786E-01-7.61106277E-05    3
 2.26116304E-08-2.48169920E-12-1.82761436E+04 5.68919266E+01                   4
IpchqE       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
HpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
IpchqF       03/07 THERMc   9h 17o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.40261447E+01 3.91510735E-02-1.36447307E-05 2.14620416E-09-1.25686284E-13    2
-3.02711970E+04-1.55538528E+02-7.50571480E+00 1.29365084E-01-8.49457148E-05    3
 2.61175818E-08-2.93195225E-12-1.53231062E+04 6.96724793E+01                   4
pchqAqjA     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1383.000    61
 3.87701785E+01 4.05701001E-02-1.43031099E-05 2.26632396E-09-1.33375118E-13    2
-5.02059409E+04-1.78442518E+02-8.87933903E+00 1.37095241E-01-9.38266116E-05    3
 3.12582966E-08-4.07841164E-12-3.45540224E+04 5.78332859E+01                   4
pchqAqjB     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqAqjC     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqAqjD     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1383.000    61
 3.82335586E+01 4.10708568E-02-1.44853761E-05 2.29573156E-09-1.35124995E-13    2
-4.84018806E+04-1.75199519E+02-5.42284740E+00 1.39331650E-01-9.82798741E-05    3
```

```
 3.46545750E-08-4.93579150E-12-3.28478713E+04 6.06240574E+01                   4
pchqAqjE     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqAqjF     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqAqjG     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqBqjA     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqBqjB     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchqBqjC     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqBqjD     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    61
 3.88373944E+01 4.05106382E-02-1.42813385E-05 2.26273461E-09-1.33156480E-13    2
-5.07396104E+04-1.78381883E+02-6.08974001E+00 1.44286101E-01-1.05987354E-04    3
 3.93031929E-08-5.92080896E-12-3.50091691E+04 6.33456442E+01                   4
pchqBqjE     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqBqjF     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqBqjG     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqCqjA     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqCqjB     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqCqjC     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchqCqjD     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    61
 3.88373944E+01 4.05106382E-02-1.42813385E-05 2.26273461E-09-1.33156480E-13    2
-5.07396104E+04-1.78381883E+02-6.08974001E+00 1.44286101E-01-1.05987354E-04    3
 3.93031929E-08-5.92080896E-12-3.50091691E+04 6.33456442E+01                   4
pchqCqjE     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
```

```
pchqCqjF     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqCqjG     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqCqjH     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjA     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqEqjB     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjC     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjD     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    61
 3.88373944E+01 4.05106382E-02-1.42813385E-05 2.26273461E-09-1.33156480E-13    2
-5.07396104E+04-1.78381883E+02-6.08974001E+00 1.44286101E-01-1.05987354E-04    3
 3.93031929E-08-5.92080896E-12-3.50091691E+04 6.33456442E+01                   4
pchqEqjE     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchqEqjF     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjG     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjH     3/7 THERMc   9h 17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
```

```
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqEqjI       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjA       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqFqjB       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjC       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjD       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    61
 3.88373944E+01 4.05106382E-02-1.42813385E-05 2.26273461E-09-1.33156480E-13    2
-5.07396104E+04-1.78381883E+02-6.08974001E+00 1.44286101E-01-1.05987354E-04    3
 3.93031929E-08-5.92080896E-12-3.50091691E+04 6.33456442E+01                   4
pchqFqjE       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjF       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchqFqjG       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjH       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqFqjI       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjA       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 3.81049259E+01 4.11317992E-02-1.44955247E-05 2.29616943E-09-1.35103697E-13    2
-4.71649911E+04-1.74006007E+02-5.93360030E+00 1.40400470E-01-9.91173253E-05    3
 3.48669995E-08-4.93342448E-12-3.15131689E+04 6.37892936E+01                   4
pchqGqjB       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjC       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjD       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    61
 3.88373944E+01 4.05106382E-02-1.42813385E-05 2.26273461E-09-1.33156480E-13    2
-5.07396104E+04-1.78381883E+02-6.08974001E+00 1.44286101E-01-1.05987354E-04    3
 3.93031929E-08-5.92080896E-12-3.50091691E+04 6.33456442E+01                   4
pchqGqjE       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjF       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjG       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchoAqB        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 3.60041124E+01 3.82305872E-02-1.34922970E-05 2.13937170E-09-1.25967486E-13    2
-6.31979770E+04-1.66852768E+02-7.54497288E+00 1.35901362E-01-9.53692576E-05    3
 3.26210071E-08-4.37867058E-12-4.77565209E+04 6.83308968E+01                   4
pchoAqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.54183172E+01 3.86794591E-02-1.36350232E-05 2.16028027E-09-1.27126034E-13    2
-6.35743002E+04-1.63022748E+02-5.63517108E+00 1.29436139E-01-8.85263032E-05    3
 2.95917939E-08-3.89452626E-12-4.88330773E+04 5.92397970E+01                   4
pchoAqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.56268779E+01 3.84375171E-02-1.35375267E-05 2.14362448E-09-1.26098872E-13    2
-6.48244012E+04-1.64632632E+02-5.58024101E+00 1.30329031E-01-9.04824647E-05    3
 3.09800547E-08-4.22230357E-12-5.00973963E+04 5.81974395E+01                   4
pchoAqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.54183172E+01 3.86794591E-02-1.36350232E-05 2.16028027E-09-1.27126034E-13    2
-6.35743002E+04-1.63022748E+02-5.63517108E+00 1.29436139E-01-8.85263032E-05    3
 2.95917939E-08-3.89452626E-12-4.88330773E+04 5.92397970E+01                   4
pchoBqA        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.45423705E+01 3.93797596E-02-1.38678694E-05 2.19579279E-09-1.29162487E-13    2
-6.41105543E+04-1.57736445E+02-4.28035245E+00 1.21770138E-01-7.78852699E-05    3
 2.36702638E-08-2.71934488E-12-4.97843861E+04 5.37405608E+01                   4
pchoBqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.57387617E+01 3.85307913E-02-1.36130699E-05 2.16006889E-09-1.27248920E-13    2
-6.69618309E+04-1.65030306E+02-8.02752406E+00 1.36075042E-01-9.46811974E-05    3
 3.19941241E-08-4.22702552E-12-5.13746504E+04 7.15567510E+01                   4
pchoBqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.53316003E+01 3.88146134E-02-1.36961130E-05 2.17139117E-09-1.27838874E-13    2
-6.85851522E+04-1.62659477E+02-5.93281566E+00 1.29960072E-01-8.90438617E-05    3
 2.99454835E-08-3.99290499E-12-5.37360218E+04 6.08146165E+01                   4
pchoBqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.51553632E+01 3.89760420E-02-1.37542051E-05 2.18069421E-09-1.28389588E-13    2
-6.73381091E+04-1.61211598E+02-6.10463182E+00 1.29567195E-01-8.77834598E-05    3
 2.89332438E-08-3.73615105E-12-5.24536398E+04 6.24016070E+01                   4
pchoBqF        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.51553632E+01 3.89760420E-02-1.37542051E-05 2.18069421E-09-1.28389588E-13    2
-6.73381091E+04-1.61211598E+02-6.10463182E+00 1.29567195E-01-8.77834598E-05    3
 2.89332438E-08-3.73615105E-12-5.24536398E+04 6.24016070E+01                   4
pchoCqA        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.47609050E+01 3.92768837E-02-1.38506246E-05 2.19499605E-09-1.29192624E-13    2
-6.50372651E+04-1.59053077E+02-6.96718720E+00 1.31261428E-01-8.95098395E-05    3
 2.98164088E-08-3.91166864E-12-5.00186252E+04 6.69708292E+01                   4
pchoCqB        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.59005225E+01 3.83732904E-02-1.35542140E-05 2.15040486E-09-1.26666744E-13    2
-6.69917206E+04-1.65805689E+02-9.16115578E+00 1.40954267E-01-1.01512745E-04    3
 3.59742680E-08-5.05944501E-12-5.11603790E+04 7.70173186E+01                   4
pchoCqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.62202481E+01 3.80963583E-02-1.34580959E-05 2.13538810E-09-1.25793350E-13    2
-6.75747238E+04-1.68570592E+02-8.84169726E+00 1.32922613E-01-9.07484901E-05    3
 2.97368110E-08-3.75065544E-12-5.21319350E+04 6.46031112E+01                   4
pchoCqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.53167408E+01 3.88186972E-02-1.36953604E-05 2.17102710E-09-1.27807024E-13    2
-6.73678674E+04-1.61984919E+02-7.24189292E+00 1.34459115E-01-9.46311111E-05    3
 3.46599553E-08-4.94404674E-12-5.16899654E+04 6.93522537E+01                   4
pchoCqF        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.53167408E+01 3.88186972E-02-1.36953604E-05 2.17102710E-09-1.27807024E-13    2
-6.73678674E+04-1.61984919E+02-7.24189292E+00 1.34459115E-01-9.46311111E-05    3
 3.29219143E-08-4.57018221E-12-5.22387244E+04 6.78797117E+01                   4
pchoCqG        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.53167408E+01 3.88186972E-02-1.36953604E-05 2.17102710E-09-1.27807024E-13    2
-6.73678674E+04-1.61984919E+02-7.24189292E+00 1.34459115E-01-9.46311111E-05    3
 3.29219143E-08-4.57018221E-12-5.22387244E+04 6.78797117E+01                   4
pchoEqA        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.47609050E+01 3.92768837E-02-1.38506246E-05 2.19499605E-09-1.29192624E-13    2
-6.50372651E+04-1.59053077E+02-6.96718720E+00 1.31261428E-01-8.95098395E-05    3
 2.98164088E-08-3.91166864E-12-5.00186252E+04 6.69708292E+01                   4
pchoEqB        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.54604392E+01 3.86959002E-02-1.36536832E-05 2.16466163E-09-1.27444267E-13    2
-6.74010940E+04-1.63153128E+02-7.68443440E+00 1.34143986E-01-9.19671694E-05    3
 3.03894379E-08-3.88132795E-12-5.19757473E+04 7.03071106E+01                   4
pchoEqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.54604392E+01 3.86959002E-02-1.36536832E-05 2.16466163E-09-1.27444267E-13    2
-6.74010940E+04-1.63153128E+02-7.68443440E+00 1.34143986E-01-9.19671694E-05    3
 3.03894379E-08-3.88132795E-12-5.19757473E+04 7.03071106E+01                   4
pchoEqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.62202481E+01 3.80963583E-02-1.34580959E-05 2.13538810E-09-1.25793350E-13    2
-6.75747238E+04-1.68570592E+02-6.84169726E+00 1.32922613E-01-9.07484901E-05    3
 2.97368110E-08-3.75065544E-12-5.21319350E+04 6.46031112E+01                   4
pchoEqF        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.59005225E+01 3.83732904E-02-1.35542140E-05 2.15040486E-09-1.26666744E-13    2
-6.69917206E+04-1.65805689E+02-9.16115578E+00 1.40954267E-01-1.01512745E-04    3
 3.59742680E-08-5.05944501E-12-5.11603790E+04 7.70173186E+01                   4
pchoEqG        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.54604392E+01 3.86959002E-02-1.36536832E-05 2.16466163E-09-1.27444267E-13    2
-6.74010940E+04-1.63153128E+02-7.68443440E+00 1.34143986E-01-9.19671694E-05    3
 3.03894379E-08-3.88132795E-12-5.19757473E+04 7.03071106E+01                   4
pchoEqH        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.54604392E+01 3.86959002E-02-1.36536832E-05 2.16466163E-09-1.27444267E-13    2
-6.74010940E+04-1.63153128E+02-7.68443440E+00 1.34143986E-01-9.19671694E-05    3
 3.03894379E-08-3.88132795E-12-5.19757473E+04 7.03071106E+01                   4
pchoEqI        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.53167408E+01 3.88186972E-02-1.36953604E-05 2.17102710E-09-1.27807024E-13    2
-6.73678674E+04-1.61984919E+02-7.24189292E+00 1.34459115E-01-9.46311111E-05    3
 3.29219143E-08-4.57018221E-12-5.22387244E+04 6.78797117E+01                   4
pchoFqA    1/18/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 3.29226252E+01 3.98938423E-02-1.38460372E-05 2.17096339E-09-1.26828581E-13    2
-6.31147077E+04-1.45160864E+02-3.40007112E+00 1.26059354E-01-9.37301842E-05    3
 3.67027009E-08-5.97698432E-12-5.05092309E+04 4.96572984E+01                   4
pchoFqB    1/18/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.33308396E+01 3.97264416E-02-1.38265948E-05 2.17180713E-09-1.27031126E-13    2
-6.54098027E+04-1.47305849E+02-3.41652788E+00 1.28211454E-01-9.75421014E-05    3
 3.92025235E-08-6.54266798E-12-5.27702689E+04 4.93534953E+01                   4
pchoFqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.50177888E+01 3.90903869E-02-1.37923120E-05 2.18643936E-09-1.28713840E-13    2
-6.73685902E+04-1.60079929E+02-5.68277543E+00 1.29966069E-01-9.05658942E-05    3
 3.15367537E-08-4.44045528E-12-5.27736506E+04 6.00717648E+01                   4
pchoFqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.53152855E+01 3.86564231E-02-1.36032357E-05 2.15288509E-09-1.26598552E-13    2
-6.86358861E+04-1.62155349E+02-5.88189922E+00 1.31915876E-01-9.39410727E-05    3
 3.36650282E-08-4.90298598E-12-5.39980620E+04 6.02185837E+01                   4
pchoFqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.55977670E+01 3.86489215E-02-1.36526624E-05 2.16606343E-09-1.27588365E-13    2
-6.69921969E+04-1.63882170E+02-7.63142319E+00 1.36560517E-01-9.75749100E-05    3
 3.46599553E-08-4.94404674E-12-5.16899654E+04 6.93522537E+01                   4
```

```
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjF       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.87112327E+01 4.05677748E-02-1.42898047E-05 2.26287206E-09-1.33116180E-13    2
-4.95010770E+04-1.77195990E+02-6.53459910E+00 1.45105767E-01-1.06481256E-04    3
 3.93124023E-08-5.87499986E-12-3.36856930E+04 6.61961691E+01                   4
pchqGqjG       3/7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1382.000    61
 3.84063258E+01 4.09609297E-02-1.44561917E-05 2.29213299E-09-1.34955672E-13    2
-5.18124253E+04-1.76675679E+02-4.78260868E+00 1.36374920E-01-9.34049806E-05    3
 3.14495162E-08-4.20537333E-12-3.62660118E+04 5.72251048E+01                   4
pchoAqB        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 3.60041124E+01 3.82305872E-02-1.34922970E-05 2.13937170E-09-1.25967486E-13    2
-6.31979770E+04-1.66852768E+02-7.54497288E+00 1.35901362E-01-9.53692576E-05    3
 3.26210071E-08-4.37867058E-12-4.77565209E+04 6.83308968E+01                   4
pchoAqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.54183172E+01 3.86794591E-02-1.36350232E-05 2.16028027E-09-1.27126034E-13    2
-6.35743002E+04-1.63022748E+02-5.63517108E+00 1.29436139E-01-8.85263032E-05    3
 2.95917939E-08-3.89452626E-12-4.88330773E+04 5.92397970E+01                   4
pchoAqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.56268779E+01 3.84375171E-02-1.35375267E-05 2.14362448E-09-1.26098872E-13    2
-6.48244012E+04-1.64632632E+02-5.58024101E+00 1.30329031E-01-9.04824647E-05    3
 3.09800547E-08-4.22230357E-12-5.00973963E+04 5.81974395E+01                   4
pchoAqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.54183172E+01 3.86794591E-02-1.36350232E-05 2.16028027E-09-1.27126034E-13    2
-6.35743002E+04-1.63022748E+02-5.63517108E+00 1.29436139E-01-8.85263032E-05    3
 2.95917939E-08-3.89452626E-12-4.88330773E+04 5.92397970E+01                   4
pchoBqA        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1377.000    51
 3.45423705E+01 3.93797596E-02-1.38678694E-05 2.19579279E-09-1.29162487E-13    2
-6.41105543E+04-1.57736445E+02-4.28035245E+00 1.21770138E-01-7.78852699E-05    3
 2.36702638E-08-2.71934488E-12-4.97843861E+04 5.37405608E+01                   4
pchoBqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.57387617E+01 3.85307913E-02-1.36130699E-05 2.16006889E-09-1.27248920E-13    2
-6.69618309E+04-1.65030306E+02-8.02752406E+00 1.36075042E-01-9.46811974E-05    3
 3.19941241E-08-4.22702552E-12-5.13746504E+04 7.15567510E+01                   4
pchoBqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.53316003E+01 3.88146134E-02-1.36961130E-05 2.17139117E-09-1.27838874E-13    2
-6.85851522E+04-1.62659477E+02-5.93281566E+00 1.29960072E-01-8.90438617E-05    3
 2.99454835E-08-3.99290499E-12-5.37360218E+04 6.08146165E+01                   4
pchoBqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.51553632E+01 3.89760420E-02-1.37542051E-05 2.18069421E-09-1.28389588E-13    2
-6.73381091E+04-1.61211598E+02-6.10463182E+00 1.29567195E-01-8.77834598E-05    3
 2.89332438E-08-3.73615105E-12-5.24536398E+04 6.24016070E+01                   4
pchoBqF        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.51553632E+01 3.89760420E-02-1.37542051E-05 2.18069421E-09-1.28389588E-13    2
-6.73381091E+04-1.61211598E+02-6.10463182E+00 1.29567195E-01-8.77834598E-05    3
 2.89332438E-08-3.73615105E-12-5.24536398E+04 6.24016070E+01                   4
pchoCqA        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.47609050E+01 3.92768837E-02-1.38506246E-05 2.19499605E-09-1.29192624E-13    2
-6.50372651E+04-1.59053077E+02-6.96718720E+00 1.31261428E-01-8.95098395E-05    3
 2.98164088E-08-3.91166864E-12-5.00186252E+04 6.69708292E+01                   4
pchoCqB        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 3.59005225E+01 3.83732904E-02-1.35542140E-05 2.15040486E-09-1.26666744E-13    2
-6.69917206E+04-1.65805689E+02-9.16115578E+00 1.40954267E-01-1.01512745E-04    3
 3.59742680E-08-5.05944501E-12-5.11603790E+04 7.70173186E+01                   4
pchoCqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.62202481E+01 3.80963583E-02-1.34580959E-05 2.13538810E-09-1.25793350E-13    2
-6.75747238E+04-1.68570592E+02-8.84169726E+00 1.32922613E-01-9.07484901E-05    3
 2.97368110E-08-3.75065544E-12-5.21319350E+04 6.46031112E+01                   4
pchoCqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.53167408E+01 3.88186972E-02-1.36953604E-05 2.17102710E-09-1.27807024E-13    2
-6.73678674E+04-1.61984919E+02-7.24189292E+00 1.34459115E-01-9.46311111E-05    3
```

```
pchoFqG        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.55977670E+01 3.86489215E-02-1.36526624E-05 2.16606343E-09-1.27588365E-13    2
-6.69921969E+04-1.63882170E+02-7.63142319E+00 1.36560517E-01-9.75749100E-05    3
 3.46599553E-08-4.94404674E-12-5.16899654E+04 6.93522537E+01                   4
pchoFqH        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.50177888E+01 3.90903869E-02-1.37923120E-05 2.18643936E-09-1.28713840E-13    2
-6.73685902E+04-1.60079929E+02-5.68277543E+00 1.29966069E-01-9.05658942E-05    3
 3.15367537E-08-4.44045528E-12-5.27736506E+04 6.00717648E+01                   4
pchoFqI        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.50177888E+01 3.90903869E-02-1.37923120E-05 2.18643936E-09-1.28713840E-13    2
-6.73685902E+04-1.60079929E+02-5.68277543E+00 1.29966069E-01-9.05658942E-05    3
 3.15367537E-08-4.44045528E-12-5.27736506E+04 6.00717648E+01                   4
pchoGqC        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.50177888E+01 3.90903869E-02-1.37923120E-05 2.18643936E-09-1.28713840E-13    2
-6.73685902E+04-1.60079929E+02-5.68277543E+00 1.29966069E-01-9.05658942E-05    3
 3.15367537E-08-4.44045528E-12-5.27736506E+04 6.00717648E+01                   4
pchoGqD        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1381.000    51
 3.53152855E+01 3.86564231E-02-1.36032357E-05 2.15288509E-09-1.26598552E-13    2
-6.86358861E+04-1.62155349E+02-5.88189922E+00 1.31915876E-01-9.39410727E-05    3
 3.36650282E-08-4.90298598E-12-5.39980620E+04 6.02185837E+01                   4
pchoGqE        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1382.000    51
 3.50177888E+01 3.90903869E-02-1.37923120E-05 2.18643936E-09-1.28713840E-13    2
-6.73685902E+04-1.60079929E+02-5.68277543E+00 1.29966069E-01-9.05658942E-05    3
 3.15367537E-08-4.44045528E-12-5.27736506E+04 6.00717648E+01                   4
pchoGqF        3/7  THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1383.000    51
 3.55977670E+01 3.86489215E-02-1.36526624E-05 2.16606343E-09-1.27588365E-13    2
-6.69921969E+04-1.63882170E+02-7.63142319E+00 1.36560517E-01-9.75749100E-05    3
 3.46599553E-08-4.94404674E-12-5.16899654E+04 6.93522537E+01                   4
pchoAojB   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 3.18793908E+01 3.69208333E-02-1.29131413E-05 2.03554451E-09-1.19373722E-13    2
-4.31232839E+04-1.46426234E+02-8.61940325E+00 1.27785937E-01-8.86858133E-05    3
 2.98451834E-08-3.89302486E-12-2.88152244E+04 7.21900319E+01                   4
pchoAojC   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1382.000    31
 3.17551987E+01 3.65156332E-02-1.26659126E-05 1.98618859E-09-1.16077385E-13    2
-4.36353515E+04-1.45096835E+02-7.05396458E+00 1.22615922E-01-8.31809978E-05    3
 2.71571545E-08-3.38995619E-12-2.98355378E+04 6.47312322E+01                   4
pchoAojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1376.000    31
 3.24922185E+01 3.54571717E-02-1.22211900E-05 1.90968946E-09-1.11373084E-13    2
-4.51016281E+04-1.49686515E+02-6.65522485E+00 1.21735047E-01-8.19810905E-05    3
 2.62607642E-08-3.16057501E-12-3.11471571E+04 6.21376407E+01                   4
pchoBojA   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1370.000    31
 3.12891981E+01 3.66206702E-02-1.26527078E-05 1.98009787E-09-1.15593449E-13    2
-4.43508711E+04-1.42143559E+02-5.11681883E+00 1.12173173E-01-6.80036432E-05    3
 1.82008457E-08-1.51273830E-12-3.08714619E+04 5.65658179E+01                   4
pchoBojC   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.14751123E+01 3.75073671E-02-1.31688001E-05 2.08096752E-09-1.22240539E-13    2
-4.68556746E+04-1.43868178E+02-8.79004704E+00 1.26671791E-01-8.62984755E-05    3
 2.83589342E-08-3.59092992E-12-3.24824950E+04 7.39544965E+01                   4
pchoBojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 3.17714011E+01 3.64963808E-02-1.26625263E-05 1.98634031E-09-1.16124165E-13    2
-4.86930098E+04-1.45319937E+02-7.10354497E+00 1.21968523E-01-8.18527265E-05    3
 2.63166093E-08-3.21839547E-12-3.47744557E+04 6.51698910E+01                   4
pchoBojE   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 3.11399327E+01 3.74490628E-02-1.30736158E-05 2.05835508E-09-1.20612097E-13    2
-4.72899647E+04-1.41366897E+02-7.36025190E+00 1.22195666E-01-8.20505052E-05    3
 2.66074923E-08-3.32197151E-12-3.34838437E+04 6.71097066E+01                   4
pchoCojA   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 3.08879018E+01 3.75002436E-02-1.30583185E-05 2.05277587E-09-1.20165568E-13    2
-4.50407108E+04-1.39995337E+02-8.00117998E+00 1.22753967E-01-8.18452386E-05    3
 2.61436986E-08-3.17445152E-12-3.10789752E+04 7.06802702E+01                   4
pchoCojB   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
```

```
 3.16014094E+01 3.74304959E-02-1.31488327E-05 2.07851854E-09-1.22124507E-13    2
-4.68810314E+04-1.44462309E+02-9.77629517E+00 1.30905043E-01-9.22140702E-05    3
 3.18255976E-08-4.32183702E-12-3.22905801E+04 7.87315532E+01                   4
pchoCojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 3.26059863E+01 3.58538055E-02-1.24569515E-05 1.95604115E-09-1.14436016E-13    2
-4.76638469E+04-1.50927707E+02-7.94735698E+00 1.24667246E-01-8.32678040E-05    3
 2.59945527E-08-2.96299872E-12-3.31803839E+04 6.86544089E+01                   4
pchoCojE   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoCojF   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoEojA   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 3.08879018E+01 3.75002436E-02-1.30583185E-05 2.05277587E-09-1.20165568E-13    2
-4.50407108E+04-1.39995337E+02-8.00117998E+00 1.22753967E-01-8.18452386E-05    3
 2.61436986E-08-3.17445152E-12-3.10789752E+04 7.06802702E+01                   4
pchoEojB   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoEojC   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoEojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 3.26059863E+01 3.58538055E-02-1.24569515E-05 1.95604115E-09-1.14436016E-13    2
-4.76638469E+04-1.50927707E+02-7.94735698E+00 1.24667246E-01-8.32678040E-05    3
 2.59945527E-08-2.96299872E-12-3.31803839E+04 6.86544089E+01                   4
pchoEojF   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 3.16014094E+01 3.74304959E-02-1.31488327E-05 2.07851854E-09-1.22124507E-13    2
-4.68810314E+04-1.44462309E+02-9.77629517E+00 1.30905043E-01-9.22140702E-05    3
 3.18255976E-08-4.32183702E-12-3.22905801E+04 7.87315532E+01                   4
pchoEojG   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoEojH   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoEojI   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 3.10163286E+01 3.78760823E-02-1.32897797E-05 2.09907800E-09-1.23259710E-13    2
-4.72548347E+04-1.40630326E+02-7.84832341E+00 1.24390913E-01-8.53170354E-05    3
 2.87665379E-08-3.83121702E-12-3.33708020E+04 6.95493571E+01                   4
pchoFojA   1/18/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 3.00305086E+01 3.64947792E-02-1.23456070E-05 1.90472253E-09-1.10094240E-13    2
-4.34851703E+04-1.31564603E+02-4.35983830E+00 1.16804160E-01-8.40227685E-05    3
 3.10749566E-08-4.68706021E-12-3.15729226E+04 5.30921518E+01                   4
pchoFojB   1/18/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.95117939E+01 3.78373634E-02-1.29808829E-05 2.01973827E-09-1.17369763E-13    2
-4.54201246E+04-1.28526047E+02-4.76906418E+00 1.21156716E-01-9.20121615E-05    3
 3.67886302E-08-6.06810075E-12-3.37837182E+04 5.45290159E+01                   4
pchoFojC   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19009713E+01 3.60497703E-02-1.24436090E-05 1.94612905E-09-1.13559812E-13    2
-4.76390228E+04-1.45211811E+02-7.14073681E+00 1.23059233E-01-8.45179002E-05    3
 2.82664646E-08-3.68211530E-12-3.37652600E+04 6.57878374E+01                   4
pchoFojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19926235E+01 3.60295345E-02-1.24487159E-05 1.94813423E-09-1.13723880E-13    2
-4.88565730E+04-1.46187664E+02-6.64101400E+00 1.22013398E-01-8.36945432E-05    3
 2.80464601E-08-3.67855667E-12-3.50975586E+04 6.26792748E+01                   4
pchoFojE   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 3.16081628E+01 3.70743610E-02-1.29502506E-05 2.03977541E-09-1.19559642E-13    2
-4.69497751E+04-1.44173520E+02-8.89378408E+00 1.29235573E-01-9.18978258E-05    3
 3.23479211E-08-4.52842262E-12-3.27197642E+04 7.40872295E+01                   4
pchoFojG   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 3.16081628E+01 3.70743610E-02-1.29502506E-05 2.03977541E-09-1.19559642E-13    2
-4.69497751E+04-1.44173520E+02-8.89378408E+00 1.29235573E-01-9.18978258E-05    3
 3.23479211E-08-4.52842262E-12-3.27197642E+04 7.40872295E+01                   4
pchoFojH   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19009713E+01 3.60497703E-02-1.24436090E-05 1.94612905E-09-1.13559812E-13    2
-4.76390228E+04-1.45211811E+02-7.14073681E+00 1.23059233E-01-8.45179002E-05    3
 2.82664646E-08-3.68211530E-12-3.37652600E+04 6.57878374E+01                   4
pchoFojI   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19009713E+01 3.60497703E-02-1.24436090E-05 1.94612905E-09-1.13559812E-13    2
-4.76390228E+04-1.45211811E+02-7.14073681E+00 1.23059233E-01-8.45179002E-05    3
 2.82664646E-08-3.68211530E-12-3.37652600E+04 6.57878374E+01                   4
pchoGojD   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19926235E+01 3.60295345E-02-1.24487159E-05 1.94813423E-09-1.13723880E-13    2
-4.88565730E+04-1.46187664E+02-6.64101400E+00 1.22013398E-01-8.36945432E-05    3
 2.80464601E-08-3.67855667E-12-3.50975586E+04 6.26792748E+01                   4
pchoGojE   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 3.19009713E+01 3.60497703E-02-1.24436090E-05 1.94612905E-09-1.13559812E-13    2
-4.76390228E+04-1.45211811E+02-7.14073681E+00 1.23059233E-01-8.45179002E-05    3
 2.82664646E-08-3.68211530E-12-3.37652600E+04 6.57878374E+01                   4
pchoGojF   7/ 6/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 3.16081628E+01 3.70743610E-02-1.29502506E-05 2.03977541E-09-1.19559642E-13    2
-4.69497751E+04-1.44173520E+02-8.89378408E+00 1.29235573E-01-9.18978258E-05    3
 3.23479211E-08-4.52842262E-12-3.27197642E+04 7.40872295E+01                   4
ApchohB    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 3.02199926E+01 4.00075858E-02-1.38770782E-05 2.17533378E-09-1.27075848E-13    2
-3.51907796E+04-1.37673925E+02-8.53544797E+00 1.25938803E-01-8.44205835E-05    3
 2.75191639E-08-3.46357878E-12-2.13732267E+04 7.19314902E+01                   4
BpchohA    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 2047.000    41
 2.56451664E+01 4.48380133E-02-1.59315165E-05 2.55101854E-09-1.51583145E-13    2
-3.18512866E+04-1.09908973E+02-8.63800115E+00 1.21717072E-01-7.68626023E-05    3
 2.26898348E-08-2.45892009E-12-2.03470861E+04 7.43046234E+01                   4
BpchohC    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
CpchohB    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
CpchohD    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1374.000    41
 3.10490524E+01 3.81609625E-02-1.30176873E-05 2.02033115E-09-1.17276619E-13    2
-3.80890645E+04-1.41894013E+02-7.82997644E+00 1.20431499E-01-7.43820544E-05    3
 2.02338172E-08-1.67644530E-12-2.39705350E+04 6.95511391E+01                   4
DpchohC    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    41
 2.99217965E+01 4.02534436E-02-1.39599176E-05 2.18803268E-09-1.27805036E-13    2
-3.74574020E+04-1.35628358E+02-7.30301599E+00 1.20867243E-01-7.77706056E-05    3
 2.38440141E-08-2.72551087E-12-2.39828011E+04 6.63986860E+01                   4
DpchohE    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    41
 2.99217965E+01 4.02534436E-02-1.39599176E-05 2.18803268E-09-1.27805036E-13    2
-3.74574020E+04-1.35628358E+02-7.30301599E+00 1.20867243E-01-7.77706056E-05    3
 2.38440141E-08-2.72551087E-12-2.39828011E+04 6.63986860E+01                   4
EpchohD    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1374.000    41
 3.10490524E+01 3.81609625E-02-1.30176873E-05 2.02033115E-09-1.17276619E-13    2
-3.80890645E+04-1.41894013E+02-7.82997644E+00 1.20431499E-01-7.43820544E-05    3
 2.02338172E-08-1.67644530E-12-2.39705350E+04 6.95511391E+01                   4
EpchohF    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
FpchohE    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
FpchohG    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
GpchohF    3/14/7 THERMc   9h  17o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 3.00236718E+01 3.97548661E-02-1.37052134E-05 2.14031654E-09-1.24724978E-13    2
-3.65458956E+04-1.35758686E+02-8.18910002E+00 1.21242170E-01-7.58790623E-05    3
 2.16536553E-08-2.08801343E-12-2.26659304E+04 7.19488858E+01                   4
pcho-AB    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    21
 2.98551182E+01 3.89919310E-02-1.36094001E-05 2.14217184E-09-1.25494113E-13    2
-3.79485735E+04-1.41976147E+02-1.10554380E+01 1.30886249E-01-9.03730800E-05    3
 3.03747148E-08-3.96443137E-12-2.35022065E+04 7.88291612E+01                   4
pcho-BC    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 3.04531276E+01 3.84533819E-02-1.34166359E-05 2.11133779E-09-1.23668080E-13    2
-4.02897035E+04-1.45136931E+02-1.16739868E+01 1.35616260E-01-9.77570059E-05    3
 3.48435486E-08-4.91480433E-12-2.56704620E+04 8.13293604E+01                   4
pcho-CD    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 3.05545002E+01 3.84412393E-02-1.34286502E-05 2.11488712E-09-1.23942037E-13    2
-4.15175899E+04-1.46180944E+02-1.11529136E+01 1.34518456E-01-9.69099340E-05    3
 3.46504977E-08-4.92610509E-12-2.70070721E+04 7.81133839E+01                   4
pcho-DE    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 3.10732539E+01 3.77916570E-02-1.32537400E-05 2.09281916E-09-1.22872459E-13    2
-4.17682012E+04-1.49201214E+02-1.11332577E+01 1.34211978E-01-9.60359873E-05    3
 3.38410465E-08-4.71383243E-12-2.70055324E+04 7.80606566E+01                   4
pcho-EF    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 3.09645440E+01 3.78170025E-02-1.32477104E-05 2.09034417E-09-1.22666457E-13    2
-4.05378153E+04-1.48116790E+02-1.16499989E+01 1.35296862E-01-9.68742695E-05    3
 3.40361405E-08-4.70435374E-12-2.56697205E+04 8.12553983E+01                   4
pcho-FG    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 3.09645440E+01 3.78170025E-02-1.32477104E-05 2.09034417E-09-1.22666457E-13    2
-4.05378153E+04-1.48116790E+02-1.16499989E+01 1.35296862E-01-9.68742695E-05    3
 3.40361405E-08-4.70435374E-12-2.56697205E+04 8.12553983E+01                   4
pcho-AC    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    11
 2.95401099E+01 3.97106821E-02-1.38638839E-05 2.18263234E-09-1.27881596E-13    2
-3.85138692E+04-1.43042805E+02-1.34516561E+01 1.37295717E-01-9.65100823E-05    3
 3.31293152E-08-4.43667690E-12-2.34514362E+04 8.86058362E+01                   4
pcho-AD    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    01
 2.96586989E+01 3.98271632E-02-1.38615497E-05 2.17810872E-09-1.27458343E-13    2
-5.01542754E+04-1.45612522E+02-1.46986029E+01 1.40841430E-01-9.96268588E-05    3
 3.43393650E-08-4.60613754E-12-3.46715164E+04 9.32364140E+01                   4
pcho-AE    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    01
 2.88803084E+01 3.90170600E-02-1.32733600E-05 2.05541149E-09-1.19102947E-13    2
-5.12609367E+04-1.54989343E+02-1.73470759E+01 1.49140662E-01-1.11863344E-04    3
 4.13751864E-08-6.00244747E-12-3.57210592E+04 9.20233664E+01                   4
pcho-AF    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1376.000    01
 3.08923300E+01 4.01077000E-02-1.42582856E-05 2.27175685E-09-1.34209685E-13    2
-5.00445865E+04-1.58815902E+02-1.53274239E+01 1.39436805E-01-9.22998161E-05    3
 2.86361338E-08-3.30911283E-12-3.32024014E+04 9.23652648E+01                   4
pcho-BD    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    11
 3.02545248E+01 3.91296454E-02-1.36688664E-05 2.15273197E-09-1.26161726E-13    2
-4.20854955E+04-1.47325588E+02-1.35836913E+01 1.41089628E-01-1.03279197E-04    3
 3.75340607E-08-5.42345941E-12-2.69513760E+04 8.80479871E+01                   4
pcho-BE    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    11
 3.03968141E+01 3.91945330E-02-1.37344915E-05 2.16765081E-09-1.27225001E-13    2
-5.14411456E+04-1.49252450E+02-1.52289437E+01 1.43988922E-01-1.03887088E-04    3
 3.66275461E-08-5.05724452E-12-3.55963079E+04 9.61238085E+01                   4
pcho-BF    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    11
 3.06985721E+01 3.91914601E-02-1.37914878E-05 2.18275531E-09-1.28360745E-13    2
-5.48885133E+04-1.55024513E+02-1.66096149E+01 1.47221622E-01-1.05924112E-04    3
 3.69704796E-08-5.02302509E-12-3.84011267E+04 9.96161929E+01                   4
pcho-BG    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1376.000    11
 3.20472387E+01 3.88387639E-02-1.38524992E-05 2.21187684E-09-1.30867305E-13    2
-5.26391282E+04-1.65183523E+02-1.57378441E+01 1.43061373E-01-9.75814020E-05    3
 3.14856652E-08-3.85811900E-12-3.53991405E+04 9.39292899E+01                   4
pcho-CE    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    21
 3.06661802E+01 3.85028132E-02-1.34867410E-05 2.12797229E-09-1.24872199E-13    2
-4.11037949E+04-1.49264739E+02-1.40397517E+01 1.41726656E-01-1.03059096E-04    3
 3.68139191E-08-5.17947021E-12-2.56214031E+04 9.09911028E+01                   4
pcho-CF    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    21
 3.09186005E+01 3.85373445E-02-1.35558654E-05 2.14489078E-09-1.26110644E-13    2
-5.16914544E+04-1.52286543E+02-1.52029511E+01 1.43659619E-01-1.02977403E-04    3
 3.57913122E-08-4.83795706E-12-3.55959091E+04 9.60404169E+01                   4
pcho-CG    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    21
 3.12351605E+01 3.85044240E-02-1.35989054E-05 2.15744834E-09-1.27083582E-13    2
-5.51418207E+04-1.58135875E+02-1.65863406E+01 1.46902511E-01-1.05010808E-04    3
 3.61135780E-08-4.79540103E-12-3.84003655E+04 9.95452556E+01                   4
pcho-DF    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 3.13021253E+01 3.78110656E-02-1.33100318E-05 2.10695425E-09-1.23917679E-13    2
-4.25872119E+04-1.53415323E+02-1.35171292E+01 1.40385442E-01-1.01404441E-04    3
 3.58325213E-08-4.97938409E-12-2.69533332E+04 8.78095243E+01                   4
pcho-DG    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 3.15754751E+01 3.78061860E-02-1.33610026E-05 2.12058231E-09-1.24946617E-13    2
-5.31795146E+04-1.56547203E+02-1.46755625E+01 1.42305028E-01-1.01286180E-04    3
 3.47675651E-08-4.62443868E-12-3.69289114E+04 9.28343936E+01                   4
pcho-EG    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 3.11877702E+01 3.78453455E-02-1.33079213E-05 2.10517200E-09-1.23755096E-13    2
-4.13543005E+04-1.52298363E+02-1.40214599E+01 1.41423611E-01-1.02182763E-04    3
 3.59958192E-08-4.96376628E-12-2.56196149E+04 9.09450877E+01                   4
pcho-EI    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 3.11877702E+01 3.78453455E-02-1.33079213E-05 2.10517200E-09-1.23755096E-13    2
-4.13543005E+04-1.52298363E+02-1.40214599E+01 1.41423611E-01-1.02182763E-04    3
 3.59958192E-08-4.96376628E-12-2.56196149E+04 9.09450877E+01                   4
pcho-FH    3/14/7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 3.11877702E+01 3.78453455E-02-1.33079213E-05 2.10517200E-09-1.23755096E-13    2
-4.13543005E+04-1.52298363E+02-1.40214599E+01 1.41423611E-01-1.02182763E-04    3
 3.59958192E-08-4.96376628E-12-2.56196149E+04 9.09450877E+01                   4
pcho-EH    1/21/ 8 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    31
 2.74222144E+01 3.99642542E-02-1.37895250E-05 2.15354343E-09-1.25460632E-13    2
-4.41052827E+04-1.26053016E+02-1.40031541E+01 1.45973726E-01-1.20096269E-04    3
 5.14325849E-08-8.93574526E-12-3.06146373E+04 9.31966295E+01                   4
ApchoB     1/17/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    21
 3.01708679E+01 3.56765766E-02-1.23660645E-05 1.93853975E-09-1.13276075E-13    2
-3.14715385E+04-1.39365990E+02-7.68482278E+00 1.18350041E-01-7.83113593E-05    3
 2.44723789E-08-2.83400972E-12-1.78903867E+04 6.57549447E+01                   4
BpchoA     1/17/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    21
 2.88622886E+01 3.67089369E-02-1.27000263E-05 1.98799878E-09-1.16036610E-13    2
-2.93605026E+04-1.32278783E+02-4.73319136E+00 1.06764714E-01-6.46790324E-05    3
 1.76862665E-08-1.59018552E-12-1.69287780E+04 5.10130896E+01                   4
ApchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 2.85741415E+01 3.71931383E-02-1.30088404E-05 2.05057537E-09-1.20249755E-13    2
-2.76041370E+04-1.28456677E+02-7.64727326E+00 1.14635128E-01-7.32928613E-05    3
 2.20609745E-08-2.44565134E-12-1.43640426E+04 6.85296275E+01                   4
CpchoA     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2030.000    31
```

```
 2.46392494E+01 4.14764369E-02-1.48626255E-05 2.39286895E-09-1.42707182E-13    2
-2.28017353E+04-1.04572951E+02-6.60738741E+00 1.09651094E-01-6.65903592E-05    3
 1.82759196E-08-1.72387924E-12-1.21291964E+04 6.40060538E+01                   4
DpchoA     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2018.000    31
 2.31338824E+01 4.32236201E-02-1.55597622E-05 2.51078048E-09-1.49913682E-13    2
-2.31589079E+04-9.54885216E+01-4.07733603E+00 9.89304418E-02-5.33818181E-05    3
 1.17363117E-08-5.71849360E-13-1.34927273E+04 5.26582432E+01                   4
ApchoE     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.68941930E+01 3.78364167E-02-1.30492321E-05 2.03732728E-09-1.18666705E-13    2
-2.56552324E+04-1.15734635E+02-5.22302459E+00 1.12172453E-01-7.92182296E-05    3
 2.90960029E-08-4.41429368E-12-1.43843984E+04 5.70808416E+01                   4
EpchoA     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2030.000    31
 2.46392494E+01 4.14764369E-02-1.48626255E-05 2.39286895E-09-1.42707182E-13    2
-2.28017353E+04-1.04572951E+02-6.60738741E+00 1.09651094E-01-6.65903592E-05    3
 1.82759196E-08-1.72387924E-12-1.21291964E+04 6.40060538E+01                   4
ApchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 2.73930575E+01 3.66587233E-02-1.24891682E-05 1.93488425E-09-1.12124637E-13    2
-2.59035140E+04-1.18176265E+02-4.17393004E+00 1.09528608E-01-7.69230401E-05    3
 2.80116001E-08-4.19917475E-12-1.48344493E+04 5.17033065E+01                   4
FpchoA     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2030.000    31
 2.46392494E+01 4.14764369E-02-1.48626255E-05 2.39286895E-09-1.42707182E-13    2
-2.28017353E+04-1.04572951E+02-6.60738741E+00 1.09651094E-01-6.65903592E-05    3
 1.82759196E-08-1.72387924E-12-1.21291964E+04 6.40060538E+01                   4
BpchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 2.99219626E+01 3.62467305E-02-1.26342149E-05 1.98723374E-09-1.16369436E-13    2
-3.13673886E+04-1.37891945E+02-8.67474531E+00 1.22793685E-01-8.49751253E-05    3
 2.87281910E-08-3.79837251E-12-1.77015668E+04 7.05169513E+01                   4
CpchoB     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    21
 3.01708679E+01 3.56765766E-02-1.23660645E-05 1.93853975E-09-1.13276075E-13    2
-3.14715385E+04-1.39365990E+02-7.68482278E+00 1.18350041E-01-7.83113593E-05    3
 2.44723789E-08-2.83400972E-12-1.78903867E+04 6.57549447E+01                   4
DpchoB     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2026.000    31
 2.23176394E+01 4.44011334E-02-1.60700929E-05 2.60105952E-09-1.55590373E-13    2
-2.66936299E+04-9.05613888E+01-4.45054852E+00 9.87515348E-02-5.24988972E-05    3
 1.12515906E-08-4.97208360E-13-1.71297509E+04 5.53564889E+01                   4
EpchoB     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2031.000    31
 2.41993523E+01 4.20261249E-02-1.50941754E-05 2.43363797E-09-1.45275649E-13    2
-2.64814481E+04-1.01743808E+02-7.07149754E+00 1.09806233E-01-6.60126597E-05    3
 1.78075778E-08-1.62356430E-12-1.57513140E+04 6.71359725E+01                   4
BpchoE     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    31
 2.78087385E+01 3.57222234E-02-1.20577408E-05 1.85781570E-09-1.07290908E-13    2
-2.73966161E+04-1.19960482E+02-5.10191231E+00 1.07988291E-01-7.01526444E-05    3
 2.19403828E-08-2.57754284E-12-1.56350243E+04 5.82159395E+01                   4
BpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
FpchoB     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2031.000    31
 2.41993523E+01 4.20261249E-02-1.50941754E-05 2.43363797E-09-1.45275649E-13    2
-2.64814481E+04-1.01743808E+02-7.07149754E+00 1.09806233E-01-6.60126597E-05    3
 1.78075778E-08-1.62356430E-12-1.57513140E+04 6.71359725E+01                   4
BpchoG     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
GpchoB     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 2031.000    31
 2.41993523E+01 4.20261249E-02-1.50941754E-05 2.43363797E-09-1.45275649E-13    2
-2.64814481E+04-1.01743808E+02-7.07149754E+00 1.09806233E-01-6.60126597E-05    3
 1.78075778E-08-1.62356430E-12-1.57513140E+04 6.71359725E+01                   4
DpchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 2.99219626E+01 3.62467305E-02-1.26342149E-05 1.98723374E-09-1.16369436E-13    2
-3.13673886E+04-1.37891945E+02-8.67474531E+00 1.22793685E-01-8.49751253E-05    3
 2.87281910E-08-3.79837251E-12-1.77015668E+04 7.05169513E+01                   4
EpchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1366.000    31
 2.90162197E+01 3.57998231E-02-1.23270231E-05 1.92501870E-09-1.12220452E-13    2
-2.91565436E+04-1.30012390E+02-7.24081886E+00 1.09427717E-01-6.32326685E-05    3
 1.46323891E-08-6.06491692E-13-1.56625119E+04 6.83022426E+01                   4
EpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
FpchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1366.000    31
 2.90162197E+01 3.57998231E-02-1.23270231E-05 1.92501870E-09-1.12220452E-13    2
-2.91565436E+04-1.30012390E+02-7.24081886E+00 1.09427717E-01-6.32326685E-05    3
 1.46323891E-08-6.06491692E-13-1.56625119E+04 6.83022426E+01                   4
CpchoG     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
GpchoC     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1366.000    31
 2.90162197E+01 3.57998231E-02-1.23270231E-05 1.92501870E-09-1.12220452E-13    2
-2.91565436E+04-1.30012390E+02-7.24081886E+00 1.09427717E-01-6.32326685E-05    3
 1.46323891E-08-6.06491692E-13-1.56625119E+04 6.83022426E+01                   4
DpchoE     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.86023779E+01 3.65389006E-02-1.26367972E-05 1.97670699E-09-1.15292127E-13    2
-2.96226584E+04-1.27332115E+02-6.08093872E+00 1.19471190E-01-8.94322313E-05    3
 3.47675620E-08-5.54864386E-12-1.77453675E+04 5.83015535E+01                   4
DpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 2.58350001E+01 3.80038195E-02-1.29571058E-05 2.00826876E-09-1.16409320E-13    2
-2.76975410E+04-1.08026076E+02-8.68467946E-01 9.21132918E-02-5.18749690E-05    3
 1.33718486E-08-1.14062589E-12-1.75547751E+04 3.83960851E+01                   4
DpchoG     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 2.58350001E+01 3.80038195E-02-1.29571058E-05 2.00826876E-09-1.16409320E-13    2
-2.76975410E+04-1.08026076E+02-8.68467946E-01 9.21132918E-02-5.18749690E-05    3
 1.33718486E-08-1.14062589E-12-1.75547751E+04 3.83960851E+01                   4
EpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 2.91045159E+01 3.53555026E-02-1.20742510E-05 1.87383250E-09-1.08723436E-13    2
-2.98720730E+04-1.29791872E+02-5.03894345E+00 1.16857587E-01-8.71793566E-05    3
 3.37068087E-08-5.33824182E-12-1.81943166E+04 5.29571315E+01                   4
FpchoE     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.86023779E+01 3.65389006E-02-1.26367972E-05 1.97670699E-09-1.15292127E-13    2
-2.96226584E+04-1.27332115E+02-6.08093872E+00 1.19471190E-01-8.94322313E-05    3
 3.47675620E-08-5.54864386E-12-1.77453675E+04 5.83015535E+01                   4
EpchoG     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
GpchoE     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    31
 2.78087385E+01 3.57222234E-02-1.20577408E-05 1.85781570E-09-1.07290908E-13    2
-2.73966161E+04-1.19960482E+02-5.10191231E+00 1.07988291E-01-7.01526444E-05    3
 2.19403828E-08-2.57754284E-12-1.56350243E+04 5.82159395E+01                   4
GpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 2.91045159E+01 3.53555026E-02-1.20742510E-05 1.87383250E-09-1.08723436E-13    2
-2.98720730E+04-1.29791872E+02-5.03894345E+00 1.16857587E-01-8.71793566E-05    3
 3.37068087E-08-5.33824182E-12-1.81943166E+04 5.29571315E+01                   4
HpchoF     1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    31
 2.74874792E+01 3.59481194E-02-1.21240390E-05 1.86685463E-09-1.07761079E-13    2
-2.73607949E+04-1.17868293E+02-3.47707081E+00 1.03208420E-01-6.56134125E-05    3
 2.01757158E-08-2.34265070E-12-1.61802852E+04 5.01011171E+01                   4
pche1      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 2.73374593E+01 3.82152425E-02-1.32622462E-05 2.07988387E-09-1.21544261E-13    2
-2.34239849E+04-1.28131462E+02-9.73003587E+00 1.18168326E-01-7.58416274E-05    3
 2.28047765E-08-2.48240899E-12-1.00088848E+04 7.30984483E+01                   4
pche2      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1384.000    21
 2.68578253E+01 3.86130503E-02-1.33969436E-05 2.10061347E-09-1.22738288E-13    2
-2.46191974E+04-1.24746880E+02-9.32025536E+00 1.15369153E-01-7.18473602E-05    3
 2.05361028E-08-2.02122010E-12-1.13914695E+04 7.21192734E+01                   4
pche3      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 2.70485360E+01 3.84972806E-02-1.33667978E-05 2.09689330E-09-1.22560478E-13    2
-2.52676740E+04-1.25005996E+02-9.76207821E+00 1.18211438E-01-7.64139087E-05    3
 2.34524134E-08-2.67476665E-12-1.19500731E+04 7.47628381E+01                   4
pche4      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.58501012E+01 3.85635122E-02-1.32657880E-05 2.06764814E-09-1.20294002E-13    2
-2.35601610E+04-1.15105292E+02-7.32073560E+00 1.15508053E-01-8.16673304E-05    3
 2.98747575E-08-4.48819427E-12-1.19696258E+04 6.32636657E+01                   4
pche5      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.57170848E+01 3.87370065E-02-1.33382103E-05 2.08019877E-09-1.21073220E-13    2
-2.28780454E+04-1.15078054E+02-7.71000874E+00 1.16105464E-01-8.17794788E-05    3
 2.96771717E-08-4.40690675E-12-1.11943253E+04 6.47061131E+01                   4
pche6      3/14/ 7 THERMc   9h  16    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.57630441E+01 3.87100526E-02-1.33322528E-05 2.07966954E-09-1.21060276E-13    2
-2.30481423E+04-1.15394562E+02-7.75748952E+00 1.16063611E-01-8.15100778E-05    3
 2.94598544E-08-4.35637078E-12-1.13061010E+04 6.49789642E+01                   4
Apche2     3/14/ 7 THERMc   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1386.000    21
 2.75312793E+01 3.60877560E-02-1.26560519E-05 1.99841809E-09-1.17328708E-13    2
-6.56615342E+03-1.29202265E+02-9.84852017E+00 1.18075723E-01-7.89987726E-05    3
 2.53824759E-08-3.11745082E-12 6.86794900E+03 7.33109819E+01                   4
Dpche2     3/14/ 7 THERMc   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1378.000    21
 2.62202583E+01 3.72472788E-02-1.30668521E-05 2.06371920E-09-1.21180253E-13    2
-8.69282425E+03-1.22678779E+02-8.41366152E+00 1.06711315E-01-6.07550544E-05    3
 1.40707422E-08-6.62464047E-13 4.38956947E+03 6.72395485E+01                   4
Cpche4     3/14/ 7 THERMc   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 2.58135126E+01 3.65903890E-02-1.27059812E-05 1.99288940E-09-1.16453056E-13    2
-6.70187880E+03-1.16428959E+02-7.35730021E+00 1.12366552E-01-7.87827692E-05    3
 2.82706784E-08-4.15150794E-12 5.01801921E+03 6.23764680E+01                   4
Dpche5     3/14/ 7      c   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1389.000    31
 2.53361450E+01 3.71257021E-02-1.29193917E-05 2.02919705E-09-1.18688368E-13    2
-7.09394899E+03-1.14577941E+02-8.22791171E+00 1.13507833E-01-7.92919812E-05    3
 2.83571934E-08-4.15695907E-12 4.80844832E+03 6.64749348E+01                   4
Epche6     3/14/ 7 THERMc   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 2.57346125E+01 3.67395674E-02-1.27757272E-05 2.00568925E-09-1.17276016E-13    2
-6.19091890E+03-1.16758021E+02-7.60873944E+00 1.12215487E-01-7.76522425E-05    3
 2.72923377E-08-3.90257310E-12 5.65015905E+03 6.32080852E+01                   4
```

```
Fpche7     3/14/ 7 THERMc   9h  15    0    0G   300.000  5000.000 1390.000    31
 2.57346125E+01 3.67395674E-02-1.27757272E-05 2.00568925E-09-1.17276016E-13    2
-6.19091890E+03-1.16758021E+02-7.60873944E+00 1.12215487E-01-7.76522425E-05    3
 2.72923377E-08-3.90257310E-12 5.65015905E+03 6.32080852E+01                   4
pche2ojA   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    21
 2.90714687E+01 3.64083818E-02-1.25741311E-05 1.96642078E-09-1.14714257E-13    2
-1.64606057E+04-1.33434040E+02-8.50976090E+00 1.16962304E-01-7.43881362E-05    3
 2.15065634E-08-2.10480335E-12-2.87611282E+03 7.06538246E+01                   4
pche1ojC   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 3.09957447E+01 3.42482726E-02-1.17281944E-05 1.82504120E-09-1.06139532E-13    2
-1.80391406E+04-1.44907287E+02-1.06207542E+01 1.29817619E-01-9.32020846E-05    3
 3.23131566E-08-4.30784211E-12-3.67370463E+03 7.87683353E+01                   4
pche2ojD   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    21
 3.06208911E+01 3.44214736E-02-1.17558385E-05 1.82600947E-09-1.06060267E-13    2
-2.10689854E+04-1.41741851E+02-8.84017138E+00 1.23471382E-01-8.57394420E-05    3
 2.84767113E-08-3.57337257E-12-7.28770430E+03 7.09106896E+01                   4
pche3ojB   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    21
 3.06924562E+01 3.44998803E-02-1.18132036E-05 1.83808815E-09-1.06889051E-13    2
-1.98656579E+04-1.41668423E+02-1.05889713E+01 1.29636184E-01-9.35506423E-05    3
 3.28518929E-08-4.47874948E-12-5.62571346E+03 8.01269990E+01                   4
pche4ojC   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.94586251E+01 3.44880016E-02-1.16599226E-05 1.79795344E-09-1.03875529E-13    2
-1.81242095E+04-1.31512150E+02-8.24768516E+00 1.27271105E-01-9.93549740E-05    3
 3.95915462E-08-6.35295866E-12-5.62620215E+03 6.91188451E+01                   4
pche3ojE   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    21
 3.06924562E+01 3.44998803E-02-1.18132036E-05 1.83808815E-09-1.06889051E-13    2
-1.98656579E+04-1.41668423E+02-1.05889713E+01 1.29636184E-01-9.35506423E-05    3
 3.28518929E-08-4.47874948E-12-5.62571346E+03 8.01269990E+01                   4
pche5ojD   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    31
 2.93077194E+01 3.46892206E-02-1.17380444E-05 1.81049230E-09-1.04602534E-13    2
-1.92242786E+04-1.31026383E+02-7.60799163E+00 1.25959207E-01-9.84540325E-05    3
 3.93699818E-08-6.34120085E-12-7.03438806E+03 6.52383346E+01                   4
pche4ojF   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.94586251E+01 3.44880016E-02-1.16599226E-05 1.79795344E-09-1.03875529E-13    2
-1.81242095E+04-1.31512150E+02-8.24768516E+00 1.27271105E-01-9.93549740E-05    3
 3.95915462E-08-6.35295866E-12-5.62620215E+03 6.91188451E+01                   4
pche6ojE   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.92459486E+01 3.48136536E-02-1.17999453E-05 1.82236560E-09-1.05390533E-13    2
-1.75515234E+04-1.31072280E+02-8.68738997E+00 1.27968525E-01-9.95685349E-05    3
 3.94849665E-08-6.30013662E-12-4.96539872E+03 7.08225738E+01                   4
pche5ojG   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.92599391E+01 3.47528456E-02-1.17683257E-05 1.81633454E-09-1.04995421E-13    2
-1.74107615E+04-1.31107902E+02-8.82063231E+00 1.28711630E-01-1.00772327E-04    3
 4.02253328E-08-6.45737923E-12-4.82363685E+03 7.14074526E+01                   4
pche7ojF   3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.92459486E+01 3.48136536E-02-1.17999453E-05 1.82236560E-09-1.05390533E-13    2
-1.75515234E+04-1.31072280E+02-8.68738997E+00 1.27968525E-01-9.95685349E-05    3
 3.94849665E-08-6.30013662E-12-4.96539872E+03 7.08225738E+01                   4
Ao2pchohB    3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 3.38497855E+01 4.21170826E-02-1.47192579E-05 2.31865550E-09-1.35899044E-13    2
-5.33311744E+04-1.52786701E+02-6.67130994E+00 1.32730375E-01-9.10595448E-05    3
 3.12161260E-08-4.29828800E-12-3.88525176E+04 6.62782812E+01                   4
Bo2pchohA    3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 3.38497855E+01 4.21170826E-02-1.47192579E-05 2.31865550E-09-1.35899044E-13    2
-5.33311744E+04-1.52786701E+02-6.67130994E+00 1.32730375E-01-9.10595448E-05    3
 3.12161260E-08-4.29828800E-12-3.88525176E+04 6.62782812E+01                   4
Bo2pchohC    3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49577795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
Co2pchohB    3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
```

```
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49557795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
Co2pchohD     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 3.45489728E+01 4.15688877E-02-1.45399844E-05 2.29167284E-09-1.34367684E-13    2
-5.69009495E+04-1.56991634E+02-6.72134713E+00 1.36146473E-01-9.72678759E-05    3
 3.52879646E-08-5.21520842E-12-4.23644422E+04 6.53437631E+01                   4
Do2pchohC     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 3.45489728E+01 4.15688877E-02-1.45399844E-05 2.29167284E-09-1.34367684E-13    2
-5.69009495E+04-1.56991634E+02-6.72134713E+00 1.36146473E-01-9.72678759E-05    3
 3.52879646E-08-5.21520842E-12-4.23644422E+04 6.53437631E+01                   4
Do2pchohE     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 3.45489728E+01 4.15688877E-02-1.45399844E-05 2.29167284E-09-1.34367684E-13    2
-5.69009495E+04-1.56991634E+02-6.72134713E+00 1.36146473E-01-9.72678759E-05    3
 3.52879646E-08-5.21520842E-12-4.23644422E+04 6.53437631E+01                   4
Eo2pchohD     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 3.45489728E+01 4.15688877E-02-1.45399844E-05 2.29167284E-09-1.34367684E-13    2
-5.69009495E+04-1.56991634E+02-6.72134713E+00 1.36146473E-01-9.72678759E-05    3
 3.52879646E-08-5.21520842E-12-4.23644422E+04 6.53437631E+01                   4
Eo2pchohF     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49557795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
Fo2pchohE     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49557795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
Fo2pchohG     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49557795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
Go2pchohF     3/ 7 THERMc   9h  17o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 3.45499386E+01 4.15934824E-02-1.45541486E-05 2.29447979E-09-1.34555377E-13    2
-5.57373169E+04-1.56608452E+02-8.49557795E+00 1.43093860E-01-1.06966877E-04    3
 4.10517548E-08-6.44992321E-12-4.08464131E+04 7.43023592E+01                   4
pche1e3     3/14/ 7 THERMc   9h  14    0    0G   300.000  5000.000 1385.000    11
 2.67249158E+01 3.40585410E-02-1.18269061E-05 1.85565878E-09-1.08480279E-13    2
-1.15501520E+04-1.25360357E+02-8.58105937E+00 1.13432601E-01-7.84454442E-05    3
 2.66321595E-08-3.54987068E-12 9.31850387E+02 6.52095769E+01                   4
pche2e4     3/14/ 7 THERMc   9h  14    0    0G   300.000  5000.000 1379.000    21
 2.75935989E+01 3.39305248E-02-1.20114255E-05 1.90825855E-09-1.12505232E-13    2
-1.36103564E+04-1.17615535E+02-7.52225806E+00 1.12801674E-01-7.99922888E-05    3
 2.89270956E-08-4.32273806E-12-9.81924061E+02 7.23038464E+01                   4
pche3e5     3/14/ 7 THERMc   9h  14    0    0G   300.000  5000.000 1402.000    21
 2.50376301E+01 3.24499442E-02-1.07203520E-05 1.62750774E-09-9.30136964E-14    2
-3.80955444E+03-1.11875608E+02-8.73412964E+00 1.15806384E-01-8.89048655E-05    3
 3.46668522E-08-5.38937522E-12 7.26040127E+03 6.75631499E+01                   4
pche4e6     3/14/ 7 THERMc   9h  14    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    31
 2.57088397E+01 3.36248244E-02-1.15687214E-05 1.80328976E-09-1.04918797E-13    2
-1.02857506E+04-1.13926882E+02-8.01120963E+00 1.18685862E-01-9.53954560E-05    3
 3.99595791E-08-6.81126701E-12 8.04394503E+02 6.49540673E+01                   4
pche5e7     3/14/ 7 THERMc   9h  14    0    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.50117024E+01 3.42256111E-02-1.17784584E-05 1.83633404E-09-1.06856682E-13    2
-8.73781894E+03-1.09857596E+02-7.26708094E+00 1.12080637E-01-8.43019157E-05    3
 3.28552432E-08-5.23105719E-12 2.21062198E+03 6.26025302E+01                   4
pchoA       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1375.000    31
 2.97954971E+01 3.79365617E-02-1.31076546E-05 2.05051580E-09-1.19648440E-13    2
-4.90979786E+04-1.38020194E+02-7.11889338E+00 1.15192679E-01-7.03579998E-05    3
 1.91216819E-08-1.64498840E-12-3.55180419E+04 6.31934921E+01                   4
pchoyA      3/14/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1373.000    31
 2.94070527E+01 3.57610148E-02-1.23673970E-05 1.93608588E-09-1.13032510E-13    2
-3.01471244E+04-1.34271095E+02-6.34956819E+00 1.10405959E-01-6.73047379E-05    3
 1.80398935E-08-1.47736397E-12-1.69888685E+04 6.06745304E+01                   4
pchoB       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1377.000    31
 2.91603434E+01 3.88783478E-02-1.35143172E-05 2.12196183E-09-1.24114204E-13    2
-5.27354723E+04-1.34161135E+02-7.51193056E+00 1.15149878E-01-6.97616951E-05    3
 1.88713445E-08-1.63536878E-12-3.91531045E+04 6.59749077E+01                   4
pchoC       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    31
 2.90081601E+01 3.93052422E-02-1.37227951E-05 2.16051899E-09-1.26591467E-13    2
-5.26735706E+04-1.33237412E+02-8.43376649E+00 1.19259481E-01-7.58609962E-05    3
 2.27364024E-08-2.50768477E-12-3.89739958E+04 7.04267606E+01                   4
pchoE       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    31
 2.90081601E+01 3.93052422E-02-1.37227951E-05 2.16051899E-09-1.26591467E-13    2
-5.26735706E+04-1.33237412E+02-8.43376649E+00 1.19259481E-01-7.58609962E-05    3
 2.27364024E-08-2.50768477E-12-3.89739958E+04 7.04267606E+01                   4
pchoF       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.95367112E+01 3.81098355E-02-1.31611243E-05 2.05850202E-09-1.20107724E-13    2
-5.29432863E+04-1.35862779E+02-7.13669433E+00 1.15519719E-01-7.19347175E-05    3
 2.06619351E-08-2.08039426E-12-3.94618252E+04 6.38989278E+01                   4
pchoG       3/14/ 7 THERMc   9h  16o   1    0G   300.000  5000.000 1374.000    31
 2.95367112E+01 3.81098355E-02-1.31611243E-05 2.05850202E-09-1.20107724E-13    2
-5.29432863E+04-1.35862779E+02-7.13669433E+00 1.15519719E-01-7.19347175E-05    3
 2.06619351E-08-2.08039426E-12-3.94618252E+04 6.38989278E+01                   4
DpchqBqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39781937E+02 0.33192076E-01-0.93190247E-05 0.12977774E-08-0.72883546E-13    2
-0.41641547E+05-0.17606839E+03-0.35701182E+01 0.13876890E+00-0.99720004E-04    3
 0.33979209E-07-0.45808570E-11-0.28213006E+05 0.53253849E+02                   4
FpchqBqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40082935E+02 0.33263732E-01-0.94212974E-05 0.13239577E-08-0.75011706E-13    2
-0.42199809E+05-0.17818491E+03-0.30924931E+01 0.13450304E+00-0.86858352E-04    3
 0.20391131E-07 0.21988515E-12-0.28657453E+05 0.51110172E+02                   4
GpchqBqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40082935E+02 0.33263732E-01-0.94212974E-05 0.13239577E-08-0.75011706E-13    2
-0.41797227E+05-0.17818491E+03-0.30924931E+01 0.13450304E+00-0.86858352E-04    3
 0.20391131E-07 0.21988515E-12-0.28254873E+05 0.51110172E+02                   4
IpchqBqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40082935E+02 0.33263732E-01-0.94212974E-05 0.13239577E-08-0.75011706E-13    2
-0.41797227E+05-0.17818491E+03-0.30924931E+01 0.13450304E+00-0.86858352E-04    3
 0.20391131E-07 0.21988515E-12-0.28254873E+05 0.51110172E+02                   4
DpchqCqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39902008E+02 0.32990009E-01-0.92124219E-05 0.12743768E-08-0.71050059E-13    2
-0.41418816E+05-0.17674161E+03-0.35854437E+01 0.13888551E+00-0.10002748E-03    3
 0.34314073E-07-0.47090192E-11-0.27939758E+05 0.53317352E+02                   4
FpchqCqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40142277E+02 0.33170134E-01-0.93787157E-05 0.13157849E-08-0.74435500E-13    2
-0.41952137E+05-0.17851802E+03-0.34938931E+01 0.13728964E+00-0.93559574E-04    3
 0.27088481E-07-0.21535601E-11-0.28342781E+05 0.52809769E+02                   4
GpchqCqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40142277E+02 0.33170134E-01-0.93787157E-05 0.13157849E-08-0.74435500E-13    2
-0.41549555E+05-0.17851802E+03-0.34938931E+01 0.13728964E+00-0.93559574E-04    3
 0.27088481E-07-0.21535601E-11-0.27940201E+05 0.52809769E+02                   4
HpchqCqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40142277E+02 0.33170134E-01-0.93787157E-05 0.13157849E-08-0.74435500E-13    2
-0.41549555E+05-0.17851802E+03-0.34938931E+01 0.13728964E+00-0.93559574E-04    3
 0.27088481E-07-0.21535601E-11-0.27940201E+05 0.52809769E+02                   4
IpchqCqE                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40142277E+02 0.33170134E-01-0.93787157E-05 0.13157849E-08-0.74435500E-13    2
-0.41549555E+05-0.17851802E+03-0.34938931E+01 0.13728964E+00-0.93559574E-04    3
 0.27088481E-07-0.21535601E-11-0.27940201E+05 0.52809769E+02                   4
DpchqCqF   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.04754640E+01 3.88002154E-02-1.37166007E-05 2.17736919E-09-1.28303538E-13    2
-4.59811451E+04-1.85540918E+02-5.53736604E+00 1.44481084E-01-1.05727889E-04    3
 3.83893067E-08-5.58069803E-12-2.98837264E+04 6.21190641E+01                   4
EpchqCqF   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
GpchqCqF   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
HpchqCqF   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
IpchqCqF   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
ApchqDqF   1/22/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.09047611E+01 3.84886790E-02-1.36214015E-05 2.16382776E-09-1.27569700E-13    2
-4.49542739E+04-1.88798663E+02-6.31975139E+00 1.48712235E-01-1.11849020E-04    3
 4.20294973E-08-6.35809390E-12-2.85985137E+04 6.47766327E+01                   4
BpchqDqF   1/21/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
CpchqDqF   1/28/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
GpchqDqF   1/22/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
HpchqDqF   7/19/ 7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
BpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
CpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
DpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.04754640E+01 3.88002154E-02-1.37166007E-05 2.17736919E-09-1.28303538E-13    2
-4.59811451E+04-1.85540918E+02-5.53736604E+00 1.44481084E-01-1.05727889E-04    3
 3.83893067E-08-5.58069803E-12-2.98837264E+04 6.21190641E+01                   4
FpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
HpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
IpchqEqG   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
BpchqEqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
CpchqEqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
DpchqEqH   1/17/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.04754640E+01 3.88002154E-02-1.37166007E-05 2.17736919E-09-1.28303538E-13    2
-4.59811451E+04-1.85540918E+02-5.53736604E+00 1.44481084E-01-1.05727889E-04    3
 3.83893067E-08-5.58069803E-12-2.98837264E+04 6.21190641E+01                   4
FpchqEqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
GpchqEqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
IpchqEqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
BpchqEqI   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
CpchqEqI   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
GpchqEqI   1/18/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 4.00834978E+01 3.91383697E-02-1.38348780E-05 2.19603973E-09-1.29400323E-13    2
-4.48937501E+04-1.82929463E+02-6.09865530E+00 1.43753294E-01-1.02846650E-04    3
 3.60446144E-08-4.99177526E-12-2.86230968E+04 6.61049600E+01                   4
CpchqFqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
DpchqFqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1380.000    71
 3.92349548E+01 3.98708357E-02-1.40896190E-05 2.23597594E-09-1.31731277E-13    2
-4.55169289E+04-1.78241460E+02-3.48870219E+00 1.32238067E-01-8.74660127E-05    3
 2.75000213E-08-3.27542660E-12-2.99906288E+04 5.37643453E+01                   4
EpchqFqH   2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 3.76961616E+01 3.84007436E-02-1.29967890E-05 2.00654837E-09-1.16056518E-13    2
-2.01476817E+04-1.66313119E+02-5.87344793E+00 1.39056222E-01-9.94147365E-05    3
 3.46108994E-08-4.65253523E-12-5.18249670E+03 6.76217200E+01                   4
Dc6e5oA     7/ 6/ 7 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    31
 1.87533632E+01 2.11438984E-02-7.15428106E-06 1.10383345E-09-6.38003382E-14    2
-6.85142738E+03-7.01438364E+01 7.30435734E-01 6.14568820E-02-4.11029744E-05    3
 1.39464686E-08-1.91355310E-12-4.18597373E+02 2.72797378E+01                   4
Fc9oAoG     1/16/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    71
 3.14659197E+01 3.37383951E-02-1.14253460E-05 1.76385238E-09-1.01991476E-13    2
-4.43649999E+04-1.28574911E+02 2.93531495E+00 9.97837565E-02-7.05750415E-05    3
 2.63069584E-08-4.09146298E-12-3.43240864E+04 2.49933463E+01                   4
Fc9oAoH     7/ 9/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1370.000    81
 2.98747876E+01 3.45786259E-02-1.16993036E-05 1.80521486E-09-1.04351068E-13    2
-4.18341533E+04-1.17277776E+02 4.10890786E+00 8.56728498E-02-4.64057003E-05    3
 1.04963951E-08-5.13336046E-13-3.19962620E+04 2.42999467E+01                   4
MeDc8oCoIrH 1/16/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    81
```

```
 2.96267272E+01 3.62166928E-02-1.25501950E-05 1.96552703E-09-1.14728809E-13    2
-4.18082751E+04-1.17313977E+02 7.45203122E-01 1.01460554E-01-6.92983566E-05    3
 2.47609880E-08-3.69967108E-12-3.14440270E+04 3.87749281E+01                   4
MeDc8oBoIrH 1/4/08      c   9h  15o   20    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.88368435E+01 0.65071113E-01-0.23963048E-04 0.40464827E-08-0.25951103E-12    2
-0.31499137E+05 0.47441864E+00-0.26377397E+01 0.11871772E+00-0.99430275E-04    3
 0.44851163E-07-0.78078741E-11-0.30383611E+05 0.52110577E+02                   4
MeEc8oAoFrI 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1386.000    81
 2.97125065E+01 3.57065597E-02-1.22803613E-05 1.91385849E-09-1.11340978E-13    2
-4.14867894E+04-1.17451902E+02 1.66225757E+00 9.95807618E-02-6.85032768E-05    3
 2.48591631E-08-3.78775770E-12-3.14699606E+04 3.39686628E+01                   4
EtDc7oEoIrA 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1386.000    81
 2.97125065E+01 3.57065597E-02-1.22803613E-05 1.91385849E-09-1.11340978E-13    2
-4.14867894E+04-1.17451902E+02 1.66225757E+00 9.95807618E-02-6.85032768E-05    3
 2.48591631E-08-3.78775770E-12-3.14699606E+04 3.39686628E+01                   4
Fc9oAoE    7/ 9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1379.000    81
 3.18505943E+01 3.33107961E-02-1.13476384E-05 1.75885705E-09-1.01985332E-13    2
-4.45655615E+04-1.30847376E+02 2.97649091E+00 9.94694908E-02-6.98559603E-05    3
 2.57080712E-08-3.94588756E-12-3.43276331E+04 2.48254832E+01                   4
MeEc8oDoIrA 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1387.000    81
 2.96138534E+01 3.60523558E-02-1.24557250E-05 1.94692598E-09-1.13492286E-13    2
-4.14556183E+04-1.17319078E+02 1.56272942E+00 9.78889609E-02-6.41372897E-05    3
 2.15662750E-08-2.98915635E-12-3.12616506E+04 3.47830154E+01                   4
c9oyAoF    7/ 9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1376.000    81
 3.02253938E+01 3.44767510E-02-1.17032733E-05 1.80958081E-09-1.04746787E-13    2
-4.67293895E+04-1.20486027E+02 3.82542118E+00 9.19629103E-02-5.90659760E-05    3
 1.95503941E-08-2.68390507E-12-3.70485182E+04 2.29464940E+01                   4
EtDc7oAoCrI 1/18/8 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.99144766E+01 3.59996957E-02-1.24827108E-05 1.95586600E-09-1.14204943E-13    2
-4.13101722E+04-1.19219214E+02-1.00440045E+00 1.06534310E-01-7.41481405E-05    3
 2.66688199E-08-3.95830545E-12-3.03437237E+04 4.75356234E+01                   4
EtDc7oAoHrI 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 3.09337278E+01 3.51551567E-02-1.21032289E-05 1.88753802E-09-1.09861225E-13    2
-4.51495369E+04-1.26602019E+02 5.07484681E-01 1.06184073E-01-7.60587321E-05    3
 2.84083204E-08-4.38532518E-12-3.45347831E+04 3.68970349E+01                   4
MeEc8oAoDrI 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1386.000    81
 2.97125065E+01 3.57065597E-02-1.22803613E-05 1.91385849E-09-1.11340978E-13    2
-4.14867894E+04-1.17451902E+02 1.66225757E+00 9.95807618E-02-6.85032768E-05    3
 2.48591631E-08-3.78775770E-12-3.14699606E+04 3.39686628E+01                   4
EtDc7oCoIrA 7/9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1386.000    81
 2.97125065E+01 3.57065597E-02-1.22803613E-05 1.91385849E-09-1.11340978E-13    2
-4.14867894E+04-1.17451902E+02 1.66225757E+00 9.95807618E-02-6.85032768E-05    3
 2.48591631E-08-3.78775770E-12-3.14699606E+04 3.39686628E+01                   4
Ac9oBoF    1/21/ 8 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1379.000    71
 3.11233118E+01 3.41906913E-02-1.16160657E-05 1.79716343E-09-1.04072185E-13    2
-4.81089940E+04-1.26341024E+02 2.46495051E+00 9.99467067E-02-6.99819410E-05    3
 2.58337117E-08-3.99244879E-12-3.79448123E+04 2.81559319E+01                   4
Ac9oDoF    7/ 9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.90181835E+01 3.67973560E-02-1.27643337E-05 2.00037018E-09-1.16814188E-13    2
-4.38599346E+04-1.12887969E+02 1.29974111E+00 9.93476795E-02-6.78934959E-05    3
 2.48443979E-08-3.88204677E-12-3.38178265E+04 3.70884181E+01                   4
Fc9oAoD    7/ 9/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1372.000    81
 2.97313237E+01 3.48126628E-02-1.18025608E-05 1.82350041E-09-1.05497978E-13    2
-4.18878252E+04-1.16179646E+02 4.58943120E+00 8.57330821E-02-4.85363569E-05    3
 1.26911055E-08-1.13300283E-12-3.23237033E+04 2.17112848E+01                   4
MeEc8oCoIrA 1/4/08      c   9h  15o   20    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.40756783E+01 0.86771622E-01-0.34801928E-04 0.62393797E-08-0.41729890E-12    2
-0.26415008E+05 0.72926910E+02-0.29907429E+01 0.12245014E+00-0.10571197E-03    3
 0.46732833E-07-0.68548734E-11-0.30538365E+05 0.53320526E+02                   4
MeEc8oAoCrI 7/10/7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1387.000    81
 2.97880962E+01 3.58695986E-02-1.23858980E-05 1.93539176E-09-1.12797263E-13    2
```

```
-4.10847203E+04-1.18183982E+02 3.74539748E-01 1.02782821E-01-7.09296535E-05    3
 2.55368408E-08-3.82694514E-12-3.06043074E+04 4.05685529E+01                   4
EtDc7oBoIrA 7/10/7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1381.000    71
 3.18298050E+01 3.33811623E-02-1.12937878E-05 1.74263199E-09-1.00733854E-13    2
-4.55668544E+04-1.31297570E+02 1.70530055E+00 1.02733686E-01-7.22490557E-05    3
 2.61846958E-08-3.88791497E-12-3.50045893E+04 3.08548089E+01                   4
Ac9oCoF    7/10/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1377.000    81
 2.96831908E+01 3.51640467E-02-1.19869089E-05 1.85842451E-09-1.07767174E-13    2
-4.43825141E+04-1.16009616E+02 3.88636797E+00 9.22357850E-02-6.09674967E-05    3
 2.15732995E-08-3.27650054E-12-3.49218003E+04 2.39797633E+01                   4
MeEc8oBoIrA 7/10/7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 3.09337278E+01 3.51551567E-02-1.21032289E-05 1.88753802E-09-1.09861225E-13    2
-4.51495369E+04-1.26602019E+02 5.07484681E-01 1.06184073E-01-7.60587321E-05    3
 2.84083204E-08-4.38532518E-12-3.45347831E+04 3.68970349E+01                   4
Fc9oAoC    7/10/ 7 THERMc   9h  15o    2    0G   300.000  5000.000 1374.000    81
 3.02598296E+01 3.43355466E-02-1.16350093E-05 1.79729596E-09-1.03978217E-13    2
-4.15167294E+04-1.19609908E+02 1.42638534E+00 9.48581779E-02-5.71983819E-05    3
 1.60129793E-08-1.55770604E-12-3.08755961E+04 3.75802614E+01                   4
c9oAoGqjF               c   9h  15o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19290017E+01 0.92171282E-01-0.37363196E-04 0.67486146E-08-0.45372687E-12    2
-0.45436879E+05 0.66876305E+02-0.35133681E+00 0.12645023E+00-0.99929326E-04    3
 0.34471313E-07-0.15741209E-11-0.50005230E+05 0.44021484E+02                   4
Hc9oAoGqF               c   9h  15o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14942043E+01 0.91542527E-01-0.37050773E-04 0.66835164E-08-0.44886664E-12    2
-0.42859133E+05 0.66084206E+02 0.12568151E+01 0.12324437E+00-0.98152937E-04    3
 0.34464524E-07-0.16774980E-11-0.47793211E+05 0.36976910E+02                   4
c9oAoGqFqjH             c   9h  15o   60    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.61417317E+00 0.96326254E-01-0.39187515E-04 0.70957493E-08-0.47789604E-12    2
-0.57651582E+05 0.61537331E+02 0.28659555E+00 0.13987815E+00-0.11005420E-03    3
 0.33157047E-07 0.97976694E-12-0.62284586E+05 0.46630081E+02                   4
c9oAoGoFqH              c   9h  14o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.11032518E+02 0.11074123E+00-0.48693168E-04 0.93120329E-08-0.65205209E-12    2
-0.70188781E+05 0.12299390E+03 0.10509672E+01 0.12655514E+00-0.99699173E-04    3
 0.30651201E-07 0.89817476E-12-0.78822062E+05 0.41712605E+02                   4
c7oyAoBoG               c   7h   9o   30    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15766535E+02 0.34107659E-01-0.11334856E-04 0.17793563E-08-0.10842504E-12    2
-0.41597469E+05-0.47571815E+02 0.27188811E+01 0.71805649E-01-0.43982876E-04    3
 0.76987590E-08 0.19493706E-11-0.38407547E+05 0.18696613E+02                   4
c6oyAoF                 c   6h   9o   20    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20434444E+01 0.48103027E-01-0.18208615E-04 0.31356886E-08-0.20392374E-12    2
-0.23651236E+05 0.32556492E+02 0.25789831E+01 0.64590007E-01-0.49646515E-04    3
 0.19607739E-07-0.22939463E-11-0.25650973E+05 0.23120913E+02                   4
c5oAqjE                 c   5h   9o   30    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.92790213E+01 0.36875311E-01-0.12888110E-04 0.20983681E-08-0.13123510E-12    2
-0.24125975E+05-0.87658920E+01 0.13628579E+01 0.69948934E-01-0.53353746E-04    3
 0.18794582E-07-0.15398432E-11-0.23150410E+05 0.27862970E+02                   4
Cc5oAqE                 c   5h   9o   30    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10095243E+02 0.34485161E-01-0.11634027E-04 0.18476217E-08-0.11358547E-12    2
-0.18312146E+05-0.89844284E+01 0.15505205E+01 0.77936172E-01-0.80164558E-04    3
 0.46116327E-07-0.10761308E-10-0.17587051E+05 0.28760378E+02                   4
Bc5oAqE                 c   5h   9o   30    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.99270535E+01 0.35819430E-01-0.12383472E-04 0.19994346E-08-0.12425423E-12    2
-0.21584785E+05-0.10652481E+02 0.18027413E+01 0.74894354E-01-0.69892478E-04    3
 0.35675889E-07-0.72549185E-11-0.20821248E+05 0.25705048E+02                   4
c5oAqEqjC               c   5h   9o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.87498121E+01 0.45478068E-01-0.16690403E-04 0.28109026E-08-0.17989684E-12    2
-0.35711629E+05 0.29693680E+01 0.27309670E+01 0.83536774E-01-0.69718830E-04    3
 0.25327658E-07-0.17411679E-11-0.36362930E+05 0.25886320E+02                   4
c5oAqEqjB               c   5h   9o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12106284E+02 0.40465612E-01-0.14355704E-04 0.23604059E-08-0.14854746E-12    2
-0.28288756E+05-0.16344719E+02 0.17671829E+01 0.85008398E-01-0.67428045E-04    3
```

```
 0.21454662E-07-0.40418653E-12-0.27252703E+05 0.30767811E+02                   4
c5oAoEqC                c   5h   8o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.32088516E+01 0.60579728E-01-0.26163132E-04 0.49401825E-08-0.34276648E-12    2
-0.48915699E+05 0.65546494E+02 0.39207497E+01 0.67004077E-01-0.50041352E-04    3
 0.13210291E-07 0.16003881E-11-0.53754227E+05 0.18569231E+02                   4
c5oAoEqB                c   5h   8o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28710470E+00 0.55055670E-01-0.23342032E-04 0.43504635E-08-0.29904952E-12    2
-0.49657961E+05 0.46274975E+02 0.25731106E+01 0.71120851E-01-0.54056527E-04    3
 0.15579356E-07 0.74742035E-12-0.52754910E+05 0.25771290E+02                   4
Ac7oBoG                 c   7h  11o   20    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.57465081E+01 0.52773427E-01-0.19852416E-04 0.34027108E-08-0.22050100E-12    2
-0.26060684E+05 0.12071907E+02 0.93713850E+00 0.83537467E-01-0.65706146E-04    3
 0.26528747E-07-0.34894837E-11-0.26476469E+05 0.30565247E+02                   4
c7oBoGqjA               c   7h  11o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26944344E+01 0.64510293E-01-0.25134512E-04 0.44147441E-08-0.29099219E-12    2
-0.39647637E+05 0.37090340E+02 0.30049584E+01 0.89698248E-01-0.69458940E-04    3
 0.24125754E-07-0.12402914E-11-0.42515223E+05 0.25586559E+02                   4
Cc7oBoGqA               c   7h  11o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33533549E+01 0.63405991E-01-0.24581897E-04 0.43027217E-08-0.28291936E-12    2
-0.37101602E+05 0.34978249E+02 0.36016924E+01 0.93754776E-01-0.84063468E-04    3
 0.39182130E-07-0.63321674E-11-0.40207145E+05 0.22540636E+02                   4
Dc7oBoGqA               c   7h  11o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.37025263E+01 0.61645929E-01-0.23521443E-04 0.40724313E-08-0.26579593E-12    2
-0.33886699E+05 0.35869377E+02 0.31020947E+01 0.98321587E-01-0.97816395E-04    3
 0.53007437E-07-0.11018631E-10-0.36942301E+05 0.26865372E+02                   4
c7oBoGqAqjC             c   7h  11o   60    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54375796E+01 0.68305947E-01-0.26764526E-04 0.47201838E-08-0.31203623E-12    2
-0.51936719E+05 0.30644737E+02 0.31825981E+01 0.10633914E+00-0.87356435E-04    3
 0.30627170E-07-0.14730001E-11-0.54745586E+05 0.30138937E+02                   4
c7oBoGqAqjD             c   7h  11o   60    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18659595E+01 0.73823661E-01-0.29471194E-04 0.52659734E-08-0.35133848E-12    2
-0.51143453E+05 0.51095490E+02 0.43557930E+01 0.10342391E+00-0.86200220E-04    3
 0.31078187E-07-0.16045798E-11-0.55726145E+05 0.24369843E+02                   4
c7oAoBoGqC              c   7h  10o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17071524E+02 0.43506615E-01-0.16022970E-04 0.27066369E-08-0.17366572E-12    2
-0.71202531E+05-0.45257080E+02 0.29678373E+01 0.92120066E-01-0.65783002E-04    3
 0.16612910E-07 0.11371451E-11-0.68557625E+05 0.23471167E+02                   4
c7oAoBoGqD              c   7h  10o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13786811E+02 0.48444510E-01-0.18356021E-04 0.31621039E-08-0.20562667E-12    2
-0.70509695E+05-0.26367142E+02 0.41797094E+01 0.88949621E-01-0.64049818E-04    3
 0.16527069E-07 0.11812038E-11-0.69542492E+05 0.17536459E+02                   4
EtDc7oEoIqjA            c   9h  15o    4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.20730462E+01 0.91257989E-01-0.36681755E-04 0.65852737E-08-0.44078597E-12    2
-0.44062090E+05 0.67535675E+02-0.16403650E+01 0.12691739E+00-0.98965931E-04    3
 0.33667408E-07-0.14365055E-11-0.48134473E+05 0.51251064E+02                   4
CEtDc7oEoIqA            c   9h  15o    4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.92819405E+00 0.88095620E-01-0.34857956E-04 0.61888694E-08-0.41100939E-12    2
-0.38346805E+05 0.65580742E+02-0.13875757E+01 0.13445264E+00-0.12469011E-03    3
 0.59903805E-07-0.10273710E-10-0.42578078E+05 0.51873787E+02                   4
DEtDc7oEoIqA            c   9h  15o    4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.17019796E+01 0.89986838E-01-0.35927875E-04 0.64205437E-08-0.42843065E-12    2
-0.42913176E+05 0.66822617E+02-0.12752949E+01 0.13353914E+00-0.12236206E-03    3
 0.58264025E-07-0.99013592E-11-0.47370898E+05 0.48627045E+02                   4
EtDc7oEoIqAqjC          c   9h  15o    6     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.31383259E+01 0.10103292E+00-0.41295982E-04 0.75005540E-08-0.50617030E-12    2
-0.55475082E+05 0.82832954E+02 0.46815168E-01 0.13827313E+00-0.10992013E-03    3
 0.34749448E-07 0.30894539E-12-0.61380859E+05 0.48615891E+02                   4
EtDc7oEoIqAqjD Therm    c   9h  15o    6     G  0300.00   5000.00  1384.00     1
 4.05030529E+01 3.66242241E-02-1.28574501E-05 2.03130466E-09-1.19294130E-13    2
-7.44979807E+04-1.67579265E+02 5.20187866E+00 1.19634472E-01-8.94824467E-05    3
 3.52254844E-08-5.79131222E-12-6.21184535E+04 2.21145556E+01                   4
```

```
EtDc7oAoEoIqC           c   9h  14o    5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.15689080E+02 0.11799451E+00-0.52420415E-04 0.10098985E-07-0.71096324E-12    2
-0.68574562E+05 0.14831674E+03 0.79051042E+00 0.12484850E+00-0.97741380E-04    3
 0.30146836E-07 0.98156563E-12-0.78724625E+05 0.43180508E+02                   4
EtDc7oAoEoIqD Therm     c   9h  14o    5     G  0300.00   5000.00  1386.00     1
 3.40674600E+01 3.48022068E-02-1.15826042E-05 1.76697150E-09-1.01318235E-13    2
-7.07651285E+04-1.33586175E+02 5.39214321E+00 1.04906033E-01-7.85536028E-05    3
 3.14699561E-08-5.22889226E-12-6.10764798E+04 1.93868266E+01                   4
Cc6oAoD                 c   6h   9o    2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.92154627E+01 0.68340041E-01-0.28726696E-04 0.53221725E-08-0.36430836E-12    2
-0.20455131E+05 0.92964493E+02 0.80882484E+00 0.77625364E-01-0.74132498E-04    3
 0.37519889E-07-0.65599327E-11-0.26797117E+05 0.27953074E+02                   4
MeCc6oAoDoG  1/7/8 THERMc   7h  10o    3    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.45254735E+01 2.62608294E-02-9.14884926E-06 1.43800082E-09-8.41491619E-14    2
-6.82182341E+04-9.17903111E+01 2.64040924E+00 7.59216897E-02-5.29347911E-05    3
 1.94647263E-08-3.01807025E-12-6.03541344E+04 2.64644652E+01                   4
MeCc6oyAoDoG 1/7/8 THERMc   7h   9o    3    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.41383222E+01 2.40722903E-02-8.40087279E-06 1.32198513E-09-7.74242093E-14    2
-4.92638171E+04-8.80407748E+01 3.36114405E+00 7.13435180E-02-5.01736605E-05    3
 1.85447735E-08-2.88185362E-12-4.18174672E+04 2.41717897E+01                   4
MeCc6oAoDoyG 1/7/8 THERMc   7h   9o    3    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.41383222E+01 2.40722903E-02-8.40087279E-06 1.32198513E-09-7.74242093E-14    2
-4.92638171E+04-8.80407748E+01 3.36114405E+00 7.13435180E-02-5.01736605E-05    3
 1.85447735E-08-2.88185362E-12-4.18174672E+04 2.41717897E+01                   4
c6oAoCoF                c   6h   8o    3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14098532E+02 0.30795943E-01-0.10932709E-04 0.17986844E-08-0.11325675E-12    2
-0.61412609E+05-0.32908203E+02-0.57053739E+00 0.80996305E-01-0.78441219E-04    3
 0.43513122E-07-0.99128535E-11-0.57809574E+05 0.40521118E+02                   4
c6oyAoCoF               c   6h   7o    3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18067482E+02 0.20482169E-01-0.58505107E-05 0.82518825E-09-0.46761541E-13    2
-0.44963820E+05-0.53090500E+02-0.45904231E+00 0.81432052E-01-0.90764937E-04    3
 0.59187816E-07-0.15965045E-10-0.40014426E+05 0.40918900E+02                   4
c6oAoCoyF               c   6h   7o    3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18067482E+02 0.20482169E-01-0.58505107E-05 0.82518825E-09-0.46761541E-13    2
-0.44963820E+05-0.53090500E+02-0.45904231E+00 0.81432052E-01-0.90764937E-04    3
 0.59187816E-07-0.15965045E-10-0.40014426E+05 0.40918900E+02                   4
Ec5oAoD                 c   5h   7o    2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24140787E+01 0.39777819E-01-0.15238291E-04 0.26444471E-08-0.17280930E-12    2
-0.19328053E+05 0.25861088E+02 0.13315578E+01 0.60074516E-01-0.52372219E-04    3
 0.24509891E-07-0.41529766E-11-0.20686230E+05 0.25315708E+02                   4
Ec5oAoC                 c   5h   7o    2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.87029057E+01 0.57888906E-01-0.24380874E-04 0.45227928E-08-0.30984986E-12    2
-0.14972970E+05 0.90179802E+02-0.16789705E+01 0.71964003E-01-0.73224946E-04    3
 0.39785750E-07-0.79061280E-11-0.20049578E+05 0.42151867E+02                   4
MeBc5oAoCrF 1/7/ 8 THERMc   6h   9o    2    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 2.01518048E+01 2.26717762E-02-7.89070781E-06 1.23940601E-09-7.24926488E-14    2
-2.95222312E+04-7.07081435E+01 1.21705261E+00 6.57273269E-02-4.57871857E-05    3
 1.67325504E-08-2.56348961E-12-2.27454876E+04 3.15416242E+01                   4
c9oAoCqjF               c   9h  15o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.41779094E+01 0.95773190E-01-0.39168801E-04 0.71177211E-08-0.48053748E-12    2
-0.46613660E+05 0.79898666E+02-0.16085118E+01 0.12763672E+00-0.99557903E-04    3
 0.33821063E-07-0.13488938E-11-0.51487285E+05 0.51796898E+02                   4
Dc9oAoCqF               c   9h  15o   40    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.35573742E+01 0.94719782E-01-0.38634251E-04 0.70085440E-08-0.47265262E-12    2
-0.44049059E+05 0.78048119E+02-0.10456243E+01 0.13193285E+00-0.11473608E-03    3
 0.49444392E-07-0.66391901E-11-0.49175719E+05 0.48931767E+02                   4
c9oAoCqFqjD             c   9h  15o   60    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13701973E+01 0.99472173E-01-0.40758074E-04 0.74159758E-08-0.50110870E-12    2
-0.58931078E+05 0.72392143E+02-0.12817020E+01 0.14323834E+00-0.11494941E-03    3
 0.37814775E-07-0.69295448E-12-0.63733543E+05 0.55025368E+02                   4
c9oAoCoFqD              c   9h  14o   50    0G   300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
-0.21894081E+02 0.12983495E+00-0.59072558E-04 0.11575034E-07-0.82496038E-12    2
-0.70532828E+05 0.18295752E+03-0.49844745E+00 0.12751600E+00-0.98543031E-04    3
 0.28860123E-07 0.19584180E-11-0.82490117E+05 0.50758362E+02                   4
MeEc8oAoCqI            c   9h  15o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62990255E+01 0.77468850E-01-0.29782859E-04 0.51834177E-08-0.33951745E-12    2
-0.48810156E+05 0.20968681E+02-0.10861167E+01 0.12299351E+00-0.92500261E-04    3
 0.31236574E-07-0.18821938E-11-0.49486301E+05 0.49518764E+02                   4
DMeEc8oAoCqI           c   9h  15o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.69497166E+01 0.76385066E-01-0.29245974E-04 0.50755848E-08-0.33180701E-12    2
-0.46261656E+05 0.18944656E+02-0.49126458E+00 0.12707229E+00-0.10716567E-03    3
 0.46356103E-07-0.69965934E-11-0.47178227E+05 0.46523777E+02                   4
GMeEc8oAoCqI           c   9h  15o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.70092278E+01 0.75226724E-01-0.28505221E-04 0.49114939E-08-0.31948164E-12    2
-0.42988723E+05 0.21273552E+02 0.11721483E+00 0.12379012E+00-0.10321677E-03    3
 0.43850044E-07-0.62575297E-11-0.44021586E+05 0.46179268E+02                   4
MeEc8oAoCqIqjD         c   9h  15o   60   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.91509008E+01 0.81063397E-01-0.31288877E-04 0.54586820E-08-0.35804367E-12    2
-0.61142234E+05 0.13919571E+02-0.58366567E+00 0.13737048E+00-0.10493544E-03    3
 0.32265891E-07-0.17261417E-12-0.61751246E+05 0.52697681E+02                   4
MeEc8oAoCqIqjG         c   9h  15o   60   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.57856483E+01 0.86201206E-01-0.33777043E-04 0.59549849E-08-0.39346952E-12    2
-0.60698688E+05 0.33232231E+02 0.82225001E+00 0.13285576E+00-0.99977740E-04    3
 0.28967033E-07 0.10063488E-11-0.63028641E+05 0.45943325E+02                   4
MeEc8oAoCoIqD          c   9h  14o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.10785287E+02 0.11025336E+00-0.48431000E-04 0.92571888E-08-0.64806477E-12    2
-0.71293500E+05 0.12052492E+03-0.25769784E+01 0.13024001E+00-0.95805452E-04    3
 0.24750278E-07 0.28223910E-11-0.78271008E+05 0.61492546E+02                   4
MeEc8oAoCoIqG          c   9h  14o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.14317171E+02 0.11589837E+00-0.51347739E-04 0.98723154E-08-0.69395103E-12    2
-0.70821430E+05 0.14065730E+03-0.13874002E+01 0.12719008E+00-0.94276213E-04    3
 0.24783596E-07 0.28529147E-11-0.79524758E+05 0.55656971E+02                   4
MeBc5oAoF  1/ 9/ 8 THERMc   6h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.10159275E+01 2.43673827E-02-8.45010952E-06 1.32412873E-09-7.73226832E-14    2
-5.08245617E+04-7.86361280E+01 2.37645397E-01 7.08275236E-02-4.77729168E-05    3
 1.63716950E-08-2.28399884E-12-4.33766855E+04 3.37344377E+01                   4
MeBc5oyAoF 1/ 9/ 8 THERMc   6h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.08727906E+01 2.20126804E-02-7.65449113E-06 1.20173109E-09-7.02702868E-14    2
-3.19968544E+04-7.63590817E+01 1.06869663E+00 6.55206346E-02-4.32226822E-05    3
 1.40420166E-08-1.79383400E-12-2.48537078E+04 3.09627260E+01                   4
c9oDoFqjA              c   9h  15o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11662315E+02 0.10787868E+00-0.45333709E-04 0.83967890E-08-0.57464054E-12    2
-0.45232492E+05 0.12178293E+03-0.17363632E+01 0.12656046E+00-0.98426623E-04    3
 0.32731720E-07-0.58687858E-12-0.52882980E+05 0.52972961E+02                   4
Cc9oDoFqA              c   9h  15o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.10995963E+02 0.10673120E+00-0.44735341E-04 0.82712956E-08-0.56536123E-12    2
-0.42683625E+05 0.11968140E+03-0.14442507E+01 0.13274308E+00-0.11815168E-03    3
 0.52904984E-07-0.74903937E-11-0.50542578E+05 0.51250160E+02                   4
c9oDoFqAqjC            c   9h  15o   60   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.90834856E+01 0.11198568E+00-0.47147118E-04 0.87443635E-08-0.59901135E-12    2
-0.57462117E+05 0.11623879E+03-0.13382232E+01 0.14163928E+00-0.11249125E-03    3
 0.35329748E-07 0.58763514E-12-0.65136473E+05 0.56596416E+02                   4
c9oAoDoFqC             c   9h  14o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.21894081E+02 0.12983495E+00-0.59072558E-04 0.11575034E-07-0.82496038E-12    2
```

```
-0.70532828E+05 0.18295752E+03-0.49844745E+00 0.12751600E+00-0.98543031E-04    3
 0.28860123E-07 0.19584180E-11-0.82490117E+05 0.50758362E+02                   4
EtDc7oArI              c   9h  17o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.19707403E+02 0.49297981E-01-0.16142314E-04 0.25086584E-08-0.15186238E-12    2
-0.22573354E+05-0.64419701E+02-0.94374871E+00 0.11347138E+00-0.89680092E-04    3
 0.40064567E-07-0.77065854E-11-0.17374340E+05 0.40198936E+02                   4
EtDc7oAqjI             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21609089E+02 0.53857230E-01-0.17990555E-04 0.28395071E-08-0.17394243E-12    2
-0.40163562E+05-0.69198051E+02 0.72488815E+00 0.11571302E+00-0.77544340E-04    3
 0.21578144E-07-0.35606788E-12-0.35004230E+05 0.36785110E+02                   4
DEtDc7oAqI             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22028727E+02 0.51586125E-01-0.16758318E-04 0.25927169E-08-0.15661912E-12    2
-0.35719324E+05-0.67469910E+02 0.34387225E+00 0.12861285E+00-0.11880427E-03    3
 0.64101762E-07-0.14958049E-10-0.30949486E+05 0.39517361E+02                   4
EtDc7oAqIqjD           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13192735E+02 0.75477123E-01-0.27927206E-04 0.47297930E-08-0.30385950E-12    2
-0.50563574E+05-0.13351852E+02 0.17226167E+01 0.13208276E+00-0.98008830E-04    3
 0.29173398E-07 0.13413072E-12-0.50234230E+05 0.36058720E+02                   4
EtDc7oAoIqD            c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12688339E+01 0.90234101E-01-0.36986999E-04 0.67309451E-08-0.45483777E-12    2
-0.63737656E+05 0.49160278E+02 0.25990255E+01 0.11769840E+00-0.83421881E-04    3
 0.22061567E-07 0.17316886E-11-0.67591664E+05 0.30067940E+02                   4
c7oAoD                 c   7h  12o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.10871086E+02 0.84257521E-01-0.36654397E-04 0.69569905E-08-0.48450442E-12    2
-0.43244383E+05 0.10404272E+03 0.13054632E+01 0.81709594E-01-0.56189387E-04    3
 0.14539792E-07 0.16800742E-11-0.49963922E+05 0.29176781E+02                   4
c7oyAoD                c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.77518487E+01 0.73803537E-01-0.30178713E-04 0.54840616E-08-0.37027925E-12    2
-0.26225336E+05 0.89327576E+02 0.15636251E+01 0.80936842E-01-0.65038796E-04    3
 0.26075456E-07-0.26360544E-11-0.32182129E+05 0.28977947E+02                   4
EtDc7oIrA              c   9h  17o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.19565617E+02 0.49528815E-01-0.16251170E-04 0.25298810E-08-0.15336200E-12    2
-0.22515910E+05-0.63623764E+02-0.87961227E+00 0.11301749E+00-0.88562476E-04    3
 0.38917076E-07-0.72881345E-11-0.17381094E+05 0.39928471E+02                   4
EtDc7oIqjA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21510096E+02 0.54011144E-01-0.18053763E-04 0.28497587E-08-0.17452549E-12    2
-0.40122602E+05-0.68639168E+02 0.49140683E+00 0.11731987E+00-0.81367718E-04    3
 0.25353172E-07-0.16764786E-11-0.34979086E+05 0.37775394E+02                   4
CEtDc7oIqA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22357227E+02 0.51598374E-01-0.16804368E-04 0.26007687E-08-0.15694958E-12    2
-0.34327375E+05-0.69046219E+02 0.76199806E+00 0.12473189E+00-0.10679629E-03    3
 0.51294872E-07-0.10409514E-10-0.29424607E+05 0.38322559E+02                   4
DEtDc7oIqA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21907801E+02 0.51779412E-01-0.16844944E-04 0.26086990E-08-0.15769165E-12    2
-0.35670355E+05-0.66790588E+02 0.53411770E+00 0.12728204E+00-0.11557591E-03    3
 0.60844513E-07-0.13792310E-10-0.30969697E+05 0.38713161E+02                   4
EtDc7oIqAqjC           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21274967E+02 0.62037967E-01-0.21507589E-04 0.34837986E-08-0.21721336E-12    2
-0.51812336E+05-0.57819473E+02 0.20896890E+01 0.12934197E+00-0.94054158E-04    3
 0.28300891E-07-0.63969847E-12-0.48216645E+05 0.35510265E+02                   4
EtDc7oIqAqjD           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13201681E+02 0.75474150E-01-0.27945607E-04 0.47379549E-08-0.30475397E-12    2
-0.50566883E+05-0.13404404E+02 0.18441200E+01 0.13125417E+00-0.96057527E-04    3
 0.27268198E-07 0.79275898E-12-0.50247418E+05 0.35542320E+02                   4
EtDc7oAoIqC            c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.99515266E+01 0.75209320E-01-0.29289291E-04 0.51439688E-08-0.33909217E-12    2
-0.65140918E+05 0.15969391E+01 0.30160072E+01 0.11457761E+00-0.78465549E-04    3
 0.20097797E-07 0.13761636E-11-0.65578969E+05 0.29312233E+02                   4
MeEc8oArI              c   9h  17o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.19707403E+02 0.49297981E-01-0.16142314E-04 0.25086584E-08-0.15186238E-12    2
-0.23197352E+05-0.64419701E+02-0.94374871E+00 0.11347138E+00-0.89680092E-04    3
```

```
 0.40064567E-07-0.77065854E-11-0.17998338E+05 0.40198936E+02                   4
MeEc8oAqjI             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21609089E+02 0.53857230E-01-0.17990555E-04 0.28395071E-08-0.17394243E-12    2
-0.40163562E+05-0.69198051E+02 0.72488815E+00 0.11571302E+00-0.77544340E-04    3
 0.21578144E-07-0.35606788E-12-0.35004230E+05 0.36785110E+02                   4
DMeEc8oAqI             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22437717E+02 0.51477388E-01-0.16760479E-04 0.25949785E-08-0.15672146E-12    2
-0.34360211E+05-0.69500443E+02 0.59730035E+00 0.12588517E+00-0.10959849E-03    3
 0.54127749E-07-0.11425517E-10-0.29407119E+05 0.39018635E+02                   4
FMeEc8oAqI             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22180155E+02 0.51896654E-01-0.16960243E-04 0.26343545E-08-0.15952982E-12    2
-0.34255055E+05-0.68053009E+02 0.54472739E+00 0.12623072E+00-0.11037310E-03    3
 0.54838313E-07-0.11653426E-10-0.29401254E+05 0.39243748E+02                   4
MeEc8oAqIqjD           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21346096E+02 0.61906517E-01-0.21423444E-04 0.34626633E-08-0.21540762E-12    2
-0.51840770E+05-0.58214493E+02 0.20205386E+01 0.12982008E+00-0.95196003E-04    3
 0.29431623E-07-0.10361257E-11-0.48209238E+05 0.35803310E+02                   4
MeEc8oAqIqjF           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.21274967E+02 0.62037967E-01-0.21507589E-04 0.34837986E-08-0.21721336E-12    2
-0.51812336E+05-0.57818619E+02 0.20896890E+01 0.12934197E+00-0.94054158E-04    3
 0.28300891E-07-0.63969847E-12-0.48216645E+05 0.35511135E+02                   4
MeEc8oAoIqD            c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28963883E+01 0.87112986E-01-0.35329231E-04 0.63833174E-08-0.42926627E-12    2
-0.62361148E+05 0.40762840E+02-0.12285546E+00 0.12371016E+00-0.88464723E-04    3
 0.24256188E-07 0.11496310E-11-0.64712656E+05 0.45237259E+02                   4
MeEc8oAoIqF            c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28963883E+01 0.87112986E-01-0.35329231E-04 0.63833174E-08-0.42926627E-12    2
-0.62361148E+05 0.40762840E+02-0.12285546E+00 0.12371016E+00-0.88464723E-04    3
 0.24256188E-07 0.11496310E-11-0.64712656E+05 0.45237259E+02                   4
MeCc6oAoG              c   7h  12o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16699629E+00 0.65259933E-01-0.26677451E-04 0.48475362E-08-0.32732608E-12    2
-0.44052664E+05 0.41783421E+02-0.10262246E+01 0.86168237E-01-0.57561403E-04    3
 0.14471183E-07 0.11357007E-11-0.45717461E+05 0.40985931E+02                   4
MeCc6oyAoG             c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30024650E+01 0.55772163E-01-0.21083802E-04 0.36262842E-08-0.23555994E-12    2
-0.26997584E+05 0.28424377E+02-0.62852412E+00 0.84427297E-01-0.64085449E-04    3
 0.23687141E-07-0.23601032E-11-0.27950588E+05 0.40196232E+02                   4
MeCc6oAoyG             c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.30024650E+01 0.55772163E-01-0.21083802E-04 0.36262842E-08-0.23555994E-12    2
-0.27349842E+05 0.28424377E+02-0.62852412E+00 0.84427297E-01-0.64085449E-04    3
 0.23687141E-07-0.23601032E-11-0.28302846E+05 0.40196232E+02                   4
Bc6oAoF                c   6h   9o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.23356402E+01 0.48798803E-01-0.18737752E-04 0.32585250E-08-0.21332654E-12    2
-0.21257807E+05 0.29039005E+02 0.12393709E+01 0.75511463E-01-0.71195289E-04    3
 0.37696786E-07-0.78426449E-11-0.23115723E+05 0.26555777E+02                   4
MeEc8oIrA              c   9h  17o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13177349E+02 0.59725847E-01-0.20947586E-04 0.34174696E-08-0.21395415E-12    2
-0.19915398E+05-0.27919144E+02-0.41764379E+01 0.12319455E+00-0.10094105E-03    3
 0.45321588E-07-0.82656625E-11-0.16497166E+05 0.56529488E+02                   4
Fc9oA                  c   9h  17o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13579293E+02 0.58500309E-01-0.20298032E-04 0.32871048E-08-0.20477274E-12    2
-0.20886639E+05-0.28701164E+02-0.13138429E+01 0.11706245E+00-0.10052446E-03    3
 0.50347953E-07-0.10727433E-10-0.18193109E+05 0.42671776E+02                   4
MeEc8oIqjA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15226493E+02 0.64072147E-01-0.22710090E-04 0.37323602E-08-0.23485041E-12    2
-0.37571621E+05-0.33542084E+02-0.23520977E+01 0.12437174E+00-0.86291104E-04    3
 0.24371110E-07-0.59437251E-13-0.34143922E+05 0.52453991E+02                   4
CMeEc8oIqA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16032843E+02 0.61677266E-01-0.21440537E-04 0.34771772E-08-0.21685580E-12    2
-0.31749361E+05-0.33692123E+02-0.23426800E+01 0.13359705E+00-0.11607735E-03    3
 0.54662287E-07-0.10331206E-10-0.28561531E+05 0.54106998E+02                   4
```

```
DMeEc8oIqA             c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16032843E+02 0.61677266E-01-0.21440537E-04 0.34771772E-08-0.21685580E-12    2
-0.31749361E+05-0.33692123E+02-0.23426800E+01 0.13359705E+00-0.11607735E-03    3
 0.54662287E-07-0.10331206E-10-0.28561531E+05 0.54106998E+02                   4
MeEc8oIqAqjC           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14402573E+02 0.73192298E-01-0.26800111E-04 0.45094475E-08-0.28859125E-12    2
-0.49040656E+05-0.20167770E+02-0.90521741E+00 0.13739347E+00-0.10124595E-03    3
 0.29446280E-07 0.27246646E-12-0.47364594E+05 0.50143902E+02                   4
MeEc8oIqAqjD           c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14402573E+02 0.73192298E-01-0.26800111E-04 0.45094475E-08-0.28859125E-12    2
-0.49040656E+05-0.19474777E+02-0.90521741E+00 0.13739347E+00-0.10124595E-03    3
 0.29446280E-07 0.27246646E-12-0.47364594E+05 0.50836895E+02                   4
MeEc8oAoIqC            c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.27277520E+01 0.87397300E-01-0.35463458E-04 0.64082477E-08-0.43088328E-12    2
-0.62296102E+05 0.41702255E+02-0.79506993E-01 0.12337977E+00-0.87590692E-04    3
 0.23298391E-07 0.15193049E-11-0.64716902E+05 0.45057671E+02                   4
c9oAqjF                c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12044673E+02 0.69845855E-01-0.25560841E-04 0.42970285E-08-0.27470276E-12    2
-0.38215773E+05-0.15014397E+02 0.69657445E-01 0.12126821E+00-0.86758162E-04    3
 0.26268618E-07-0.54876888E-12-0.36990914E+05 0.39627041E+02                   4
Cc9oAqF                c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12932531E+02 0.67274563E-01-0.24169187E-04 0.40118384E-08-0.25427859E-12    2
-0.32420508E+05-0.15603394E+02 0.66144563E-01 0.13056806E+00-0.11668915E-03    3
 0.56673898E-07-0.10851707E-10-0.31406910E+05 0.41336288E+02                   4
Dc9oAqF                c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12932531E+02 0.67274563E-01-0.24169187E-04 0.40118384E-08-0.25427859E-12    2
-0.32420508E+05-0.15603394E+02 0.66144563E-01 0.13056806E+00-0.11668915E-03    3
 0.56673898E-07-0.10851707E-10-0.31406910E+05 0.41336288E+02                   4
Hc9oAqF                c   9h  17o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.12596966E+02 0.67935161E-01-0.24509232E-04 0.40814823E-08-0.25933772E-12    2
-0.32339941E+05-0.13855042E+02 0.12512095E+01 0.12218927E+00-0.97710668E-04    3
 0.39060513E-07-0.49695161E-11-0.31523482E+05 0.36383152E+02                   4
c9oAqFqjC              c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11508376E+02 0.78523315E-01-0.29447927E-04 0.50335713E-08-0.32540724E-12    2
-0.49808957E+05-0.32727509E+01 0.14229127E+01 0.13494228E+00-0.10329212E-03    3
 0.32937837E-07-0.78898606E-12-0.50201594E+05 0.37712765E+02                   4
c9oAqFqjD              c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11508376E+02 0.78523315E-01-0.29447927E-04 0.50335713E-08-0.32540724E-12    2
-0.49808930E+05-0.32729492E+01 0.14078443E+01 0.13504463E+00-0.10353331E-03    3
 0.33174590E-07-0.87158481E-12-0.50199949E+05 0.37776619E+02                   4
c9oAqFqjH              c   9h  17o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11508376E+02 0.78523315E-01-0.29447927E-04 0.50335713E-08-0.32540724E-12    2
-0.50080773E+05-0.25780029E+01 0.14750094E+01 0.13458532E+00-0.10244535E-03    3
 0.32102744E-07-0.49667714E-12-0.50478973E+05 0.38186497E+02                   4
c9oAoFqC               c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.82460718E+01 0.10618205E+00-0.45255594E-04 0.84658565E-08-0.58346855E-12    2
-0.61494977E+05 0.10365479E+03 0.21486363E+01 0.11964699E+00-0.87985092E-04    3
 0.25156368E-07 0.14203939E-11-0.68952391E+05 0.33686035E+02                   4
c9oAoFqD               c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.84019547E+01 0.10645775E+00-0.45408859E-04 0.85001703E-08-0.58616008E-12    2
-0.61433680E+05 0.10452238E+03 0.20009656E+01 0.12065759E+00-0.90378329E-04    3
 0.27510673E-07 0.59916959E-12-0.68936383E+05 0.34313309E+02                   4
c9oAoFqH               c   9h  16o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.84019547E+01 0.10645775E+00-0.45408859E-04 0.85001703E-08-0.58616008E-12    2
-0.61705422E+05 0.10452238E+03 0.20009656E+01 0.12065759E+00-0.90378329E-04    3
 0.27510673E-07 0.59916959E-12-0.69208125E+05 0.34313309E+02                   4
MeBc5oArF              c   6h  11o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.82111073E+01 0.40155079E-01-0.13979767E-04 0.22705728E-08-0.14180257E-12    2
-0.10447417E+05-0.74008026E+01-0.33821123E+01 0.86634725E-01-0.77741752E-04    3
 0.39175074E-07-0.81817097E-11-0.84581689E+04 0.47792149E+02                   4
pchoBqjE               c   9h  15o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.35698154E+02 0.31010073E-01-0.89456198E-05 0.12721248E-08-0.72570137E-13    2
-0.47677730E+05-0.16163545E+03-0.47797332E+01 0.12180372E+00-0.75612224E-04    3
 0.18047238E-07-0.50756675E-12-0.34481238E+05 0.55032608E+02                   4
CpchoBqE              c   9h  15o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36194386E+02 0.30261194E-01-0.86392947E-05 0.12197993E-08-0.69263992E-13    2
-0.45078977E+05-0.16294919E+03-0.43735304E+01 0.12714297E+00-0.93248455E-04    3
 0.36096907E-07-0.66502077E-11-0.32151982E+05 0.52726383E+02                   4
pchoBqEqjC            c   9h  15o   50   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38562927E+02 0.34417655E-01-0.10224517E-04 0.14835224E-08-0.85720303E-13    2
-0.59989492E+05-0.16936945E+03-0.47122269E+01 0.13916355E+00-0.95118849E-04    3
 0.26034154E-07-0.12238623E-11-0.46699203E+05 0.59367001E+02                   4
pchoBoEqC  1/10/ 8 THERMc   9h  14o   4    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 3.47300378E+01 3.62941623E-02-1.27136293E-05 2.00577086E-09-1.17683829E-13    2
-7.83385531E+04-1.51998479E+02-4.90044600E+00 1.32509103E-01-1.03753304E-04    3
 4.19251063E-08-6.92670021E-12-6.48899144E+04 5.96382723E+01                   4
pchoEqjB              c   9h  15o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.42454281E+01 0.94670810E-01-0.39318438E-04 0.72222424E-08-0.49131521E-12    2
-0.29584074E+05 0.64256508E+02-0.40607471E+01 0.13380551E+00-0.10762274E-03    3
 0.37578587E-07-0.19922484E-11-0.33856906E+05 0.48254677E+02                   4
DpchoEqB              c   9h  15o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
-0.37046502E+01 0.92527121E-01-0.37987546E-04 0.69226291E-08-0.46834829E-12    2
-0.26979828E+05 0.64408829E+02-0.21805189E+01 0.12886345E+00-0.10618514E-03    3
 0.40192475E-07-0.35109381E-11-0.31648539E+05 0.41313667E+02                   4
pchoEqBqjD 1/10/ 8 THERMc   9h  15o   5    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 3.85491649E+01 3.77552444E-02-1.32252233E-05 2.08643342E-09-1.22413668E-13    2
-6.10780026E+04-1.70464912E+02-3.08406382E+00 1.40483092E-01-1.12592537E-04    3
 4.67761638E-08-7.94183228E-12-4.70857986E+04 5.13302698E+01                   4
pchoBoEqD  1/10/ 8 THERMc   9h  14o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 3.50157945E+01 3.60607989E-02-1.26357317E-05 1.99392500E-09-1.17008103E-13    2
-7.89080939E+04-1.54568452E+02-2.51225673E+00 1.24201308E-01-9.26528993E-05    3
 3.55224007E-08-5.58884930E-12-6.58723459E+04 4.69012582E+01                   4
c7e6oA     7/ 6/ 7 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 2.20744340E+01 2.77127698E-02-9.42270148E-06 1.45759132E-09-8.43677986E-14    2
-2.79434809E+04-8.52617781E+01 7.83796874E-01 7.55786473E-02-5.03742246E-05    3
 1.74118721E-08-2.48572467E-12-2.03275570E+04 2.98061738E+01                   4
Ec7e6oA    7/ 6/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    41
 2.17200844E+01 2.59524656E-02-8.83110208E-06 1.36701766E-09-7.91700585E-14    2
-1.08673710E+04-8.45973389E+01 4.77913704E-01 7.38493344E-02-4.97980833E-05    3
 1.72506095E-08-2.44607312E-12-3.30469830E+03 3.01228426E+01                   4
c5e4oB     7/ 6/ 7 THERMc   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.51299061E+01 1.99344801E-02-6.89920787E-06 1.07961487E-09-6.29819809E-14    2
-2.29470024E+04-5.06856034E+01-5.31920741E-01 5.50124567E-02-3.70183833E-05    3
 1.29750012E-08-1.89756839E-12-1.72987735E+04 3.40615117E+01                   4
Cc5e4oB    7/10/ 7 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    11
 1.42439717E+01 1.88122910E-02-6.47297368E-06 1.00899066E-09-5.87036712E-14    2
-5.61086463E+03-4.69175480E+01-8.59331021E-01 5.35151580E-02-3.71454024E-05    3
 1.34785874E-08-2.03049596E-12-2.74828717E+02 3.44573788E+01                   4
c7e6oAoE   7/ 9/ 7 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    41
 2.29052750E+01 2.49119933E-02-8.46819726E-06 1.31021057E-09-7.58634278E-14    2
-4.33084771E+04-8.70653184E+01 2.15898187E+00 7.39943304E-02-5.39588732E-05    3
 2.10372908E-08-3.44012126E-12-3.60825568E+04 2.42785604E+01                   4
c7e6oyAoE  7/ 9/ 7 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    41
 2.25723316E+01 2.26612407E-02-7.69791011E-06 1.19082329E-09-6.89525310E-14    2
-2.43835434E+04-8.36367263E+01 2.94509118E+00 6.91086766E-02-5.07104860E-05    3
 1.98097999E-08-3.23709903E-12-1.75554431E+04 2.16860112E+01                   4
Dc7oA      7/ 9/ 7 THERMc   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1369.000    61
 2.29303083E+01 2.84789208E-02-9.56697649E-06 1.46907773E-09-8.46344274E-14    2
-2.03095403E+04-8.66447713E+01 2.51831473E+00 6.82280050E-02-3.51997630E-05    3
 6.85047489E-09-1.96789714E-14-1.24793541E+04 2.57113472E+01                   4
c7e3oA     7/ 9/ 7 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.14997354E+01 2.87317437E-02-9.88432798E-06 1.54055519E-09-8.96225798E-14    2
```

```
-2.87410292E+04-8.15987685E+01-9.30074531E-01 7.95474150E-02-5.39653140E-05    3
 1.90639270E-08-2.79428078E-12-2.07393954E+04 3.95148393E+01                   4
c7e4oyA    7/ 9/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 2.14656435E+01 2.56674426E-02-8.71654041E-06 1.34749222E-09-7.79680792E-14    2
-1.03652824E+04-7.95060527E+01 1.05406956E+00 7.15273135E-02-4.78247798E-05    3
 1.64861321E-08-2.33486290E-12-3.07218744E+03 3.08030634E+01                   4
Cc5e4oA    7/10/ 7      c   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    21
 1.54713514E+01 1.68864499E-02-5.72117729E-06 8.83592033E-10-5.11086991E-14    2
-2.72373975E+03-5.39511639E+01 1.03263576E+00 4.89494687E-02-3.24763290E-05    3
 1.08953861E-08-1.47576893E-12 2.45795125E+03 2.41888578E+01                   4
c6e5oAo4   7/ 9/ 7 THERMc   6h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 1.91816889E+01 2.13620052E-02-7.34271288E-06 1.14385177E-09-6.65235350E-14    2
-3.90133043E+04-6.84026699E+01 2.50569395E+00 6.15096873E-02-4.58620740E-05    3
 1.86554271E-08-3.20924485E-12-3.32168352E+04 2.09453262E+01                   4
c6e5oyAo4  7/ 9/ 7 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 1.92058176E+01 1.85168925E-02-6.31071906E-06 9.78299881E-10-5.67275923E-14    2
-2.02176761E+04-6.69569317E+01 3.24567513E+00 5.66537970E-02-4.22609728E-05    3
 1.69209048E-08-2.84278709E-12-1.46794826E+04 1.85952020E+01                   4
c5e4oAoC   7/ 9/ 7 THERMc   5h   6o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.68769642E+01 1.61913284E-02-5.67379327E-06 8.95337958E-10-5.25401315E-14    2
-3.50082224E+04-5.83230757E+01 6.87543627E-02 5.60251296E-02-4.23175060E-05    3
 1.65049826E-08-2.64604084E-12-2.91988354E+04 3.17961457E+01                   4
c5e4oyAoC  7/ 9/ 7 THERMc   5h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 1.64836434E+01 1.40142410E-02-4.93114637E-06 7.80298041E-10-4.58778183E-14    2
-1.60527831E+04-5.45415411E+01 8.15192809E-01 5.13180232E-02-3.93553532E-05    3
 1.54604269E-08-2.48263477E-12-1.06656436E+04 2.93875755E+01                   4
c6alCco    7/ 9/ 7 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1366.000    61
 2.68722788E+01 2.24932695E-02-8.02969635E-06 1.28284166E-09-7.59282884E-14    2
-3.70732549E+04-1.07975701E+02 2.87311858E+00 7.04229139E-02-4.12202640E-05    3
 1.00866241E-08-6.44829778E-13-2.79300193E+04 2.37990445E+01                   4
MeCc6oBoGrA  7/9/7 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.46880824E+01 2.63845653E-02-9.15582418E-06 1.43539891E-09-8.38492925E-14    2
-3.73386833E+04-9.62768790E+01-5.76255261E-01 8.62696006E-02-6.39892904E-05    3
 2.45492498E-08-3.86341318E-12-2.86346409E+04 3.91299191E+01                   4
c7e6oAoD   7/ 9/ 7 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    51
 2.29379227E+01 2.45731356E-02-8.38086453E-06 1.29999114E-09-7.54165769E-14    2
-4.09931059E+04-8.60711952E+01 1.72209724E+00 7.32895053E-02-5.16746692E-05    3
 1.91593167E-08-2.97030642E-12-3.34716346E+04 2.82911281E+01                   4
c7e6oyAoD  7/ 9/ 7      c   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    51
 2.24264795E+01 2.26050969E-02-7.73143276E-06 1.20147634E-09-6.97896206E-14    2
-2.19968562E+04-8.16391005E+01 2.50752681E+00 6.84748836E-02-4.86790698E-05    3
 1.81937294E-08-2.84276570E-12-1.49457239E+04 2.56903444E+01                   4
c6e5oC     7/ 9/ 7 THERMc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.81829678E+01 2.45052211E-02-8.46335590E-06 1.32244485E-09-7.70671491E-14    2
-2.70818973E+04-6.52675672E+01-3.75897473E-01 6.77164773E-02-4.80841893E-05    3
 1.84447669E-08-3.00647177E-12-2.04998688E+04 3.46619611E+01                   4
Ac6e5oC    7/ 9/ 7 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    41
 1.77472564E+01 2.23901292E-02-7.74749693E-06 1.21212119E-09-7.07002113E-14    2
-2.01149021E+03-6.04752531E+01 4.39949418E-01 6.29561516E-02-4.53182600E-05    3
 1.76489506E-08-2.91824844E+02 4.10585424E+03 3.26303436E+01                   4
c9e5oAoD   7/10/ 7 THERMc   9h  14o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.88675536E+01 3.45292008E-02-1.19228300E-05 1.86296032E-09-1.08571266E-13    2
-5.28898939E+04-1.15536858E+02 1.38622669E+00 9.84553737E-02-7.02665475E-05    3
 2.68773852E-08-4.34753747E-12-4.31627279E+04 3.24156584E+01                   4
c9e5oyAoD  7/10/ 7 THERMc   9h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    71
 2.84661228E+01 3.23697237E-02-1.11885101E-05 1.74944534E-09-1.02006562E-13    2
-3.39321695E+04-1.11711508E+02 2.14228444E+00 9.37290049E-02-6.73055552E-05    3
 2.58525529E-08-4.19203337E-12-2.46315729E+04 2.99579173E+01                   4
c9e6oAoD   7/10/ 7 THERMc   9h  14o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    81
 2.92807547E+01 3.34748948E-02-1.15074736E-05 1.79351788E-09-1.04365215E-13    2
-5.06874981E+04-1.16602034E+02 7.13706072E-01 9.86157603E-02-6.88393165E-05    3
```

```
 2.51588545E-08-3.84096399E-12-4.05127680E+04 3.75494305E+01                   4
c9e6oyAoD  7/10/ 7 THERMc   9h  13o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    81
 2.89081759E+01 3.12730451E-02-1.07556419E-05 1.67704646E-09-9.76217526E-14    2
-3.17424778E+04-1.12941103E+02 1.48611603E+00 9.38081997E-02-6.57386589E-05    3
 2.40358640E-08-3.66216546E-12-2.19839306E+04 3.50173419E+01                   4
Ac8e5oC    7/10/ 7 THERMc   8h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    61
 2.38069813E+01 3.16098001E-02-1.09133462E-05 1.70490644E-09-9.93416931E-14    2
-1.15606811E+04-8.93377977E+01-5.18171032E-01 8.81427380E-02-6.24333809E-05    3
 2.37422642E-08-3.82177543E-12-2.94666685E+03 4.16409010E+01                   4
c6e5oAoC   7/10/ 7 THERMc   6h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 1.94478160E+01 2.11666903E-02-7.37702337E-06 1.15987572E-09-6.78907843E-14    2
-3.62488011E+04-6.92702575E+01-7.62663049E-01 6.86057003E-02-5.05218154E-05    3
 1.93155693E-08-3.04883741E-12-2.92114899E+04 3.92628593E+01                   4
c6e5oyAoC  7/10/ 7 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.90485469E+01 1.90055039E-02-6.64218926E-06 1.04629198E-09-6.13226527E-14    2
-1.72927476E+04-6.54590468E+01-4.93546842E-03 6.38587456E-02-4.75153829E-05    3
 1.82566769E-08-2.88497285E-12-1.06802559E+04 3.68000066E+01                   4
Gic7al     7/10/ 7 THERMc   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 2.29054189E+01 2.92302911E-02-9.96622880E-06 1.54436554E-09-8.94939005E-14    2
-2.00273660E+04-8.76773291E+01 1.15457950E+00 7.73093903E-02-5.01438693E-05    3
 1.67275654E-08-2.29277880E-12-1.21564701E+04 3.01825709E+01                   4
Ac6oC      7/10/ 7 THERMc   6h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.92391148E+01 2.51659147E-02-8.57508083E-06 1.32847255E-09-7.69774808E-14    2
-1.85404890E+04-6.82700569E+01 2.08958703E+00 6.24878115E-02-3.97257078E-05    3
 1.33752941E-08-1.92193795E-12-1.21992557E+04 2.49951664E+01                   4
Gpc7al     7/10/ 7 THERMc   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    61
 2.27736322E+01 2.97799120E-02-1.02472913E-05 1.59734929E-09-9.29348913E-14    2
-1.99075493E+04-8.72635480E+01 6.48832789E-02 7.99452184E-02-5.20101452E-05    3
 1.72351067E-08-2.32414135E-12-1.16966938E+04 3.57794978E+01                   4
Bc5oA      7/10/ 7 THERMc   5h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    31
 0.66845322E+01 0.33922009E-01-0.11845391E-04 0.19263264E-08-0.12032020E-12    2
-0.96076836E+04-0.24671249E+01-0.17568089E+00 0.66408359E-01-0.61934203E-04    3
 0.34230158E-07-0.79713926E-11-0.88001182E+04 0.28674427E+02                   4
c7e6oAoC   7/10/ 7 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 2.24761773E+01 2.56154967E-02-8.86826304E-06 1.38817449E-09-8.10043228E-14    2
-4.07556048E+04-8.37950630E+01 4.62235278E-01 7.66917608E-02-5.48842864E-05    3
 2.06518414E-08-3.24375222E-12-3.30002507E+04 3.46855966E+01                   4
c7e6oyAoC  7/10/ 7 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    51
 2.20119241E+01 2.35801357E-02-8.19181519E-06 1.28521368E-09-7.51141884E-14    2
-2.17820742E+04-7.96342215E+01 1.31710213E+00 7.15657591E-02-5.14210044E-05    3
 1.93954647E-08-3.05300202E-12-1.44847900E+04 3.17636825E+01                   4
Cc6oA      7/10/ 7 THERMc   6h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1364.000    51
 1.98432275E+01 2.43989526E-02-8.26755769E-06 1.27699773E-09-7.38701822E-14    2
-1.63591573E+04-7.18231184E+01 2.66769549E+00 5.61404354E-02-2.64748321E-05    3
 3.60776139E-09 4.57655126E-13-9.57641147E+03 2.33632396E+01                   4
Ipc9oAoB   7/10/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    71
 3.06288284E+01 3.48015184E-02-1.18549879E-05 1.83635366E-09-1.06399630E-13    2
-3.87210596E+04-1.23945774E+02 6.42678838E+01 1.04056685E-01-7.30100711E-05    3
 2.64915492E-08-3.94566679E-12-2.82230645E+04 3.73914703E+01                   4
c2h4cohco  7/10/ 7 THERMc   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1375.000    31
 1.47337280E+01 1.25643884E-02-4.35024239E-06 6.81592295E-10-3.98170637E-14    2
-1.71469182E+04-4.55504166E+01 2.78625065E+00 3.88009924E-02-2.60598416E-05    3
 8.78900367E-09-1.20339312E-12-1.28099088E+04 1.92459988E+01                   4
Bc5oAoC    7/10/ 7 THERGc   5h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1000.000    11
-0.95265503E+01 0.59931446E-01-0.25584857E-04 0.47925139E-08-0.33066613E-12    2
-0.19081514E+05 0.92379791E+02-0.15479689E+01 0.70708588E-01-0.69866604E-04    3
 0.37012153E-07-0.71111337E-11-0.24386900E+05 0.39584663E+02                   4
Ac7oD      7/11/ 7 THERMc   7h  13o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    61
 2.25119200E+01 2.94746899E-02-1.00348912E-05 1.55377231E-09-8.99981839E-14    2
-2.26732787E+04-8.44335137E+01 1.80119964E+00 7.49149749E-02-4.81985328E-05    3
 1.63384955E-08-2.34378313E-12-1.50775486E+04 2.80251822E+01                   4
```

```
Ac7oBoD    7/11/ 7 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.40432333E+01 2.69939765E-02-9.37916146E-06 1.47158277E-09-8.60082468E-14    2
-3.91180866E+04-9.16156219E+01 3.74699360E-01 8.24604564E-02-6.01061202E-05    3
 2.31100363E-08-3.71066309E-12-3.08236802E+04 3.55931667E+01                   4
Ec7e6oAoB  7/11/ 7      c   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    31
 2.31413695E+01 2.25446007E-02-7.64865124E-06 1.18249285E-09-6.84508147E-14    2
-2.13980019E+04-8.99219255E+01 5.39366139E-01 7.56506238E-02-5.53502788E-05    3
 2.07145256E-08-3.14967032E-12-1.36121779E+04 3.13052600E+01                   4
chxoAoC    1/21/ 8 THERMc   6h   8o   2    0G   300.000  5000.000 1378.000    01
 1.82253465E+01 2.28609430E-02-7.74943219E-06 1.19734179E-09-6.92792678E-14    2
-4.86992142E+04-6.89412972E+01-2.08640668E+00 6.72509469E-02-4.35141188E-05    3
 1.37485092E-08-1.67421425E-12-4.13798772E+04 4.11663799E+01                   4
BchxoAoC   1/21/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    01
 1.87264331E+01 2.04622148E-02-7.04652040E-06 1.10040183E-09-6.41463860E-14    2
-3.66773547E+04-7.36092086E+01-3.89929932E+00 7.13337842E-02-4.96066706E-05    3
 1.68107612E-08-2.21840463E-12-2.86980141E+04 4.84847799E+01                   4
DchxoAoC   1/21/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1383.000    01
 1.93555809E+01 1.97018860E-02-6.73388091E-06 1.04632010E-09-6.07824366E-14    2
-2.72991161E+04-7.49631508E+01-2.14889676E+00 6.99400297E-02-5.12979836E-05    3
 1.89279465E-08-2.80484286E-12-1.98867217E+04 4.04393214E+01                   4
c6oAoBoyF  1/21/ 8 THERMc   6h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1377.000    41
 2.16376266E+01 1.86763947E-02-6.39064176E-06 9.93560847E-10-5.77349308E-14    2
-4.08373712E+04-7.69501253E+01 4.77828634E+00 5.63023845E-02-3.82466396E-05    3
 1.32528973E-08-1.88153415E-12-3.47820951E+04 1.42637426E+01                   4
Ec5oAoB    1/21/ 8 THERMc   5h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 1.77020869E+01 1.71725959E-02-5.83252419E-06 9.02286346E-10-5.22503519E-14    2
-2.11103551E+04-5.98910424E+01 2.45680311E+00 5.15084396E-02-3.51259212E-05    3
 1.22197853E-08-1.73269374E-12-1.56840492E+04 2.24488418E+01                   4
Fc6e1oCoE  1/21/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 2.00296010E+01 1.89068802E-02-6.58174162E-06 1.03402138E-09-6.04908616E-14    2
-2.10381628E+04-7.29750998E+01-1.08431802E+00 7.32007674E-02-6.15582233E-05    3
 2.68607171E-08-4.74791709E-12-1.41634531E+04 3.87234408E+01                   4
FpchqDqE   7/13/ 7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
pche5qD    7/13/ 7 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1395.000    51
 3.26596273E+01 3.73246113E-02-1.29061108E-05 2.01869501E-09-1.17739030E-13    2
-3.90306748E+04-1.47190599E+02-6.56527338E+00 1.34578014E-01-1.06738453E-04    3
 4.37824770E-08-7.30529917E-12-2.59774672E+04 6.14674431E+01                   4
pche5ojD   7/13/ 7 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    31
 2.93077194E+01 3.46892206E-02-1.17380444E-05 1.81049230E-09-1.04602534E-13    2
-1.92242786E+04-1.31026383E+02-7.60799163E+00 1.25959207E-01-9.84540325E-05    3
 3.93699818E-08-6.34120085E-12-7.03438806E+03 6.52383346E+01                   4
c9e1qAoF   7/13/ 7 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1385.000    91
 3.48734283E+01 3.49456745E-02-1.18133503E-05 1.82174082E-09-1.05262689E-13    2
-5.17910932E+04-1.44603808E+02 8.31428536E-01 1.18399572E-01-9.16404791E-05    3
 3.72181827E-08-6.20763065E-12-4.03325093E+04 3.68841765E+01                   4
c9e1ojAoF  7/13/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.99533125E+01 3.51455927E-02-1.19257254E-05 1.84261192E-09-1.06576721E-13    2
-4.36012813E+04-1.20833565E+02-1.03923265E-01 1.07178401E-01-7.92413847E-05    3
 3.10674500E-08-5.05981481E-12-3.32814059E+04 4.00574820E+01                   4
Dc5oBohE   7/16/ 7 THERMc   5h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    51
 1.65690913E+01 2.32614988E-02-7.57531346E-06 1.13792873E-09-6.45235272E-14    2
-3.08952176E+04-5.47925139E+01 1.52775897E+00 5.87927263E-02-3.98078955E-05    3
 1.45147311E-08-2.20650943E-12-2.57189283E+04 2.66700312E+01                   4
c5oBqjDohE 7/16/ 7 THERMc   5h   9o   4    0G   300.000  5000.000 1399.000    61
 1.89404408E+01 2.66592302E-02-8.88244542E-06 1.35385578E-09-7.75114754E-14    2
-5.19291025E+04-5.91562749E+01 3.22053566E+00 6.96614690E-02-5.62646727E-05    3
 2.56754087E-08-4.85456405E-12-4.69444774E+04 2.32955107E+01                   4
c4oAoC     7/16/ 7 THERMc   4h   6o   2    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
```

```
 1.41847931E+01 1.58666283E-02-5.54706785E-06 8.73965632E-10-5.12294486E-14    2
-4.43829277E+04-4.40018462E+01 1.06454198E+00 4.29869925E-02-2.58376501E-05    3
 7.29674821E-09-7.52799155E-13-3.94471371E+04 2.77596350E+01                   4
c4oyAoC    7/16/ 7 THERMc   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 1.37937369E+01 1.36951506E-02-4.80801085E-06 7.59657451E-10-4.46166451E-14    2
-2.54311056E+04-4.02399249E+01 1.79745445E+00 3.83263421E-02-2.29286079E-05    3
 6.28300451E-09-5.96423531E-13-2.09115656E+04 2.54163817E+01                   4
Fc9e1qDqF  7/19/ 7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 3.93066172E+01 3.72617684E-02-1.29909171E-05 2.04292388E-09-1.19591316E-13    2
-3.43930874E+04-1.63543706E+02 3.66961973E+00 1.22914218E-01-9.36998096E-05    3
 3.75389305E-08-6.22976067E-12-2.21368448E+04 2.72013516E+01                   4
Iic9e1qDqI 7/19/ 7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 3.86452301E+01 3.78777807E-02-1.32153249E-05 2.07918475E-09-1.21752244E-13    2
-3.43501785E+04-1.60750136E+02 4.33470939E+00 1.18639054E-01-8.76753941E-05    3
 3.42042469E-08-5.57436808E-12-2.23430496E+04 2.35612216E+01                   4
c9e1oFqD   7/19/ 7 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    91
 3.38025462E+01 3.75519034E-02-1.30576593E-05 2.04964384E-09-1.19825800E-13    2
-5.44635558E+04-1.39424045E+02 1.69541833E+00 1.15007098E-01-8.72681789E-05    3
 3.56170775E-08-6.09884268E-12-4.33485179E+04 3.24956429E+01                   4
c9e1oFojD  7/19/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.99400700E+01 3.57429973E-02-1.22485190E-05 1.90416085E-09-1.10581822E-13    2
-3.44613876E+04-1.20409488E+02 3.68299040E-01 1.07860632E-01-8.16599044E-05    3
 3.32024663E-08-5.63337310E-12-2.43661547E+04 3.75502391E+01                   4
EtDc7e1oIqD 7/19/7 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.45739084E+01 3.68002856E-02-1.27778518E-05 2.00389534E-09-1.17080296E-13    2
-5.31375016E+04-1.45232388E+02 1.25717948E+00 1.17508860E-01-8.98151318E-05    3
 3.64418415E-08-6.14729816E-12-4.17127876E+04 3.29183408E+01                   4
EtDc7e1oIojD 7/1/7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    71
 3.35362302E+01 3.16748943E-02-1.11912395E-05 1.77568440E-09-1.04596654E-13    2
-3.45613109E+04-1.42787502E+02 9.18995116E-01 1.04970369E-01-7.41718934E-05    3
 2.66052196E-08-3.92189363E-12-2.28604387E+04 3.35620885E+01                   4
c7e1oD     7/19/ 7 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.13576742E+01 2.89864818E-02-1.00006872E-05 1.56159030E-09-9.09606004E-14    2
-3.14291434E+04-8.08930525E+01-5.83425149E-01 7.98139128E-02-5.61558359E-05    3
 2.12378369E-08-3.40568477E-12-2.36374363E+04 3.73132064E+01                   4
Cc7e1oD    7/19/ 7 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.12373912E+01 2.71435824E-02-9.31303801E-06 1.44904679E-09-8.42032683E-14    2
-1.92888629E+04-8.18005776E+01-2.64298952E+00 8.52032068E-02-6.45360921E-05    3
 2.58647982E-08-4.28958687E-12-1.11694189E+04 4.57360510E+01                   4
Ipche4e6                   c   9h  13    0    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.24396803E+02 0.30425759E-01-0.92260943E-05 0.13596061E-08-0.79460994E-13    2
 0.53985547E+04-0.10306808E+03-0.32472494E+01 0.10273981E+00-0.70782247E-04    3
 0.17751322E-07 0.40511640E-12 0.13209457E+05 0.40769238E+02                   4
Dpche5e7                   c   9h  13    0    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.24735264E+02 0.31616587E-01-0.99174531E-05 0.14945446E-08-0.88554333E-13    2
 0.67137930E+04-0.10533627E+03-0.79997790E+00 0.99209748E-01-0.72713352E-04    3
 0.25360805E-07-0.32240172E-11 0.14044949E+05 0.27688162E+02                   4
Ipche5e7                   c   9h  13    0    0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.25061918E+02 0.31648066E-01-0.99986109E-05 0.15151846E-08-0.90158519E-13    2
 0.65470000E+04-0.10759807E+03-0.44974571E+00 0.95813163E-01-0.61906001E-04    3
 0.13792546E-07 0.87141221E-12 0.14016921E+05 0.26086020E+02                   4
Ic9oAoD    c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.34219105E+01 0.85654996E-01-0.34218647E-04 0.61159553E-08-0.40805683E-12    2
-0.26411203E+05 0.70474747E+02-0.16950083E+00 0.11561492E+00-0.10089188E-03    3
 0.46507580E-07-0.74281510E-11-0.31113051E+05 0.39675732E+02                   4
Gc7oAoD                    c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.67507248E+01 0.72766133E-01-0.29756586E-04 0.54063305E-08-0.36491483E-12    2
-0.19695957E+05 0.84196037E+02 0.31785244E+00 0.91549426E-01-0.86203057E-04    3
 0.43223967E-07-0.76733403E-11-0.25333414E+05 0.34029198E+02                   4
Ic9oBoD                    c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.66911751E+00 0.81091098E-01-0.31927986E-04 0.56499592E-08-0.37439583E-12    2
-0.32633469E+05 0.54467354E+02-0.27891896E+01 0.11870793E+00-0.99619894E-04    3
 0.44527663E-07-0.71321980E-11-0.35125707E+05 0.54071640E+02                   4
Gc7oBoD                    c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.38813927E+01 0.67963123E-01-0.27308211E-04 0.49012829E-08-0.32801303E-12    2
-0.25958951E+05 0.67555244E+02-0.21043057E+01 0.93258418E-01-0.81577346E-04    3
 0.37874739E-07-0.61793079E-11-0.29366990E+05 0.47590630E+02                   4
Ac5oBoD                    c   5h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52552395E+01 0.35142239E-01-0.12971523E-04 0.21929714E-08-0.14070102E-12    2
-0.25597727E+05 0.93235626E+01-0.15006392E+01 0.64638674E-01-0.54633532E-04    3
 0.26063045E-07-0.51115466E-11-0.24676078E+05 0.40612110E+02                   4
MeDc6oBoGrF                c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.53985219E+01 0.52236300E-01-0.19418116E-04 0.33007708E-08-0.21266738E-12    2
-0.24720992E+05 0.14867416E+02-0.21029992E+01 0.94283864E-01-0.83753497E-04    3
 0.40476394E-07-0.76303157E-11-0.24608504E+05 0.46268761E+02                   4
Bc5oAoD                    c   5h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21475275E+01 0.39643638E-01-0.15086660E-04 0.26071898E-08-0.16993884E-12    2
-0.22176418E+05 0.27034439E+02 0.13923366E+01 0.61738592E-01-0.59951450E-04    3
 0.33266325E-07-0.73288042E-11-0.23746783E+05 0.24158556E+02                   4
MeEc8e1oIqG                c   9h  16o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10624512E+02 0.70339017E-01-0.27066615E-04 0.47140674E-08-0.30894842E-12    2
-0.40735754E+05-0.66816635E+01-0.12321774E+01 0.11905866E+00-0.80887177E-04    3
 0.19484652E-07 0.18109936E-11-0.39415336E+05 0.47958569E+02                   4
MeEc8e1oIojG               c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10645637E+02 0.62892258E-01-0.23012659E-04 0.38662722E-08-0.24695461E-12    2
-0.21937502E+05-0.11960205E+02-0.38790863E+01 0.11835233E+00-0.86497530E-04    3
 0.27360651E-07-0.12417647E-11-0.19655824E+05 0.57072632E+02                   4
MeEc6e1oGrF                c   7h  11o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11211577E+02 0.39292660E-01-0.13451619E-04 0.21576012E-08-0.13350787E-12    2
 0.12972988E+04-0.21454918E+02-0.28799806E+01 0.89679681E-01-0.75999225E-04    3
 0.34428432E-07-0.61704747E-11 0.41842329E+04 0.47525200E+02                   4
Fc9e1qEqH                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19603094E+02 0.60525026E-01-0.20864842E-04 0.33630025E-08-0.20879233E-12    2
-0.22249006E+05-0.48605118E+02 0.34226526E-01 0.14154822E+00-0.13045815E-03    3
 0.63482219E-07-0.12204111E-10-0.19291371E+05 0.43304386E+02                   4
c9e1e5qH                   c   9h  16o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.49730011E+02 0.66818832E-02-0.75411339E-06 0.52498863E-10-0.18986328E-14    2
-0.33353949E+05-0.23162810E+03 0.24675305E+01 0.95055267E-01-0.48116555E-04    3
 0.61867982E-08 0.11519075E-12-0.16047672E+05 0.28083353E+02                   4
c9e1e5ojH                  c   9h  15o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.46428944E+02 0.56057828E-02-0.48775627E-06 0.19084630E-10 0.65465264E-16    2
-0.13349422E+05-0.21869493E+03-0.11395183E+00 0.93794331E-01-0.52088853E-04    3
 0.12071801E-07-0.20983057E-11 0.37060601E+04 0.36931030E+02                   4
c7e1e6qC                   c   7h  12o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23832413E+02 0.26911819E-01-0.82537435E-05 0.12271701E-08-0.72209403E-13    2
-0.14542016E+05-0.88739311E+02 0.12030940E+01 0.82989290E-01-0.53777581E-04    3
 0.13148393E-07 0.75633090E-13-0.77866938E+04 0.30252232E+02                   4
c7e1e6ojC                  c   7h  11o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21610992E+02 0.23690023E-01-0.66839266E-05 0.93551533E-09-0.52796851E-13    2
 0.50822031E+04-0.81694992E+02-0.13429130E+01 0.81478909E-01-0.57142788E-04    3
 0.18419158E-07-0.19173966E-11 0.11963295E+05 0.38943787E+02                   4
Cc7h11-16                  c   7h  11o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18185938E+02 0.24834646E-01-0.71938452E-05 0.10242798E-08-0.58383203E-13    2
 0.14980201E+05-0.66057579E+02 0.14180945E+00 0.67169607E-01-0.40498791E-04    3
 0.10709145E-07-0.73491560E-12 0.20672588E+05 0.29845211E+02                   4
c9e5oAqH   2/12/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.39312274E+01 3.73574775E-02-1.29722436E-05 2.03444078E-09-1.18866229E-13    2
-5.20246429E+04-1.40078657E+02 1.17186763E+00 1.15525209E-01-8.62272980E-05    3
 3.41637904E-08-5.64903299E-12-4.06704009E+04 3.55163078E+01                   4
c9e5oAojH  2/12/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 3.00463394E+01 3.55992989E-02-1.21876557E-05 1.89352726E-09-1.09918187E-13    2
-3.20175670E+04-1.20944051E+02-4.69762718E-03 1.07764218E-01-7.97751951E-05    3
```

```
 3.12787248E-08-5.09016175E-12-2.17121812E+04 3.98627947E+01                   4
HpchqBqE                   c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.40082935E+02 0.33263732E-01-0.94212974E-05 0.13239577E-08-0.75011706E-13    2
-0.41797227E+05-0.17818491E+03-0.30924931E+01 0.13450304E+00-0.86858352E-04    3
 0.20391131E-07 0.21988515E-12-0.28254873E+05 0.51110172E+02                   4
pche4qB    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.16928192E+01 3.87840240E-02-1.34545363E-05 2.10880639E-09-1.23162528E-13    2
-3.80430168E+04-1.41199994E+02-7.28054551E+00 1.36269038E-01-1.09253323E-04    3
 4.58623629E-08-7.87796099E-12-2.50711164E+04 6.59635284E+01                   4
pche4ojB   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    31
 2.79361118E+01 3.69223384E-02-1.27274048E-05 1.98640912E-09-1.15674142E-13    2
-1.81400180E+04-1.22870669E+02-6.99939283E+00 1.21762971E-01-9.26330006E-05    3
 3.66640093E-08-5.94079378E-12-6.32572772E+03 6.36166789E+01                   4
mche1qC    1/15/ 8 THERMc   7h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1396.000    11
 2.53331534E+01 2.99734103E-02-1.03692110E-05 1.62222150E-09-9.46225203E-14    2
-2.77932377E+04-1.10771014E+02-5.96723813E+00 1.09965003E-01-9.06458321E-05    3
 3.89379999E-08-6.79391543E-12-1.75700857E+04 5.49615104E+01                   4
mche1ojC   1/15/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    01
 2.45420040E+01 2.49872247E-02-8.45800924E-06 1.30605215E-09-7.55542407E-14    2
-9.22280484E+03-1.09760808E+02-7.22418992E+00 1.00641994E-01-7.58771457E-05    3
 2.79266282E-08-3.99432800E-12 1.42305256E+03 5.99294438E+01                   4
MeBc4e1oErD 1/15/8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    21
 1.62312706E+01 1.62714743E-02-5.50356632E-06 8.48128316E-10-4.89551010E-14    2
 1.14806866E+03-5.60826821E+01 3.53153539E-02 5.92133858E-02-5.01282532E-05    3
 2.21958555E-08-3.96297171E-12 6.26379345E+03 2.90909868E+01                   4
ch2ccho    1/15/ 8 THERMc   3h   3o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    01
 9.29160820E+00 8.07924045E-03-2.75109481E-06 4.25776615E-10-2.46466074E-14    2
 1.44568311E+04-2.21829770E+01 1.91420657E+00 2.78515042E-02-2.37358293E-05    3
 1.07362312E-08-1.96784269E-12 1.67904470E+04 1.65800863E+01                   4
pche5qB    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.17222692E+01 3.87734455E-02-1.34543894E-05 2.10917309E-09-1.23200436E-13    2
-3.74326664E+04-1.42120984E+02-8.27706804E+00 1.39580834E-01-1.13271717E-04    3
 4.79995609E-08-8.29788266E-12-2.42052763E+04 7.02105270E+01                   4
pche5ojB   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.78749104E+01 3.70042021E-02-1.27623688E-05 1.99257651E-09-1.16062271E-13    2
-1.74951660E+04-1.23268616E+02-7.51333064E+00 1.22847685E-01-9.33937153E-05    3
 3.68374971E-08-5.93823644E-12-5.52988360E+03 6.56498297E+01                   4
Amche3                     c   7h  11o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18326731E+02 0.28940262E-01-0.94693796E-05 0.14729096E-08-0.89324551E-13    2
 0.11835180E+05-0.74708748E+02-0.61164074E+01 0.97569168E-01-0.82628940E-04    3
 0.38202284E-07-0.78466799E-11 0.18719514E+05 0.51785557E+02                   4
Gc7e1e3                    c   7h  11o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19525995E+02 0.23139553E-01-0.65430295E-05 0.91795954E-09-0.51928730E-13    2
 0.20222973E+05-0.72812378E+02-0.23135931E+01 0.85766248E-01-0.74221323E-04    3
 0.34793583E-07-0.70349846E-11 0.26236350E+05 0.39716499E+02                   4
Fc9e1qAqH                  c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17743099E+02 0.64668112E-01-0.22968847E-04 0.37808427E-08-0.23818450E-12    2
-0.19223285E+05-0.39493149E+02 0.36867777E+00 0.14007956E+00-0.12579394E-03    3
 0.58838534E-07-0.10535910E-10-0.16984434E+05 0.40748074E+02                   4
c7e1e6qA                   c   7h  12o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.36426746E+02 0.89827841E-02-0.15359751E-05 0.14367971E-09-0.59472000E-14    2
-0.18237289E+05-0.16155661E+03 0.25760574E+01 0.75209372E-01-0.39016038E-04    3
 0.40703449E-08 0.11660333E-11-0.62226016E+04 0.23187206E+02                   4
Bc7e6oA                    c   7h  11o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11272528E+02 0.39708938E-01-0.13723542E-04 0.22174214E-08-0.13798385E-12    2
-0.26071543E+04-0.22951317E+02-0.41950773E-01 0.82410209E-01-0.69851601E-04    3
 0.33513132E-07-0.67059192E-11-0.44429749E+03 0.31779177E+02                   4
Ic9oCoD                    c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.29690025E+01 0.85228965E-01-0.34070101E-04 0.60934835E-08-0.40682223E-12    2
-0.27279732E+05 0.67826859E+02-0.16027951E+01 0.12157620E+00-0.10736411E-03    3
 0.48585633E-07-0.74046724E-11-0.31611686E+05 0.46274616E+02                   4
```

```
Gc7oCoD                    c   7h  11o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
-0.65698953E+01 0.72809331E-01-0.29847195E-04 0.54327312E-08-0.36720548E-12    2
-0.20458996E+05 0.83062393E+02-0.11219490E+01 0.97519375E-01-0.92599708E-04    3
 0.45125855E-07-0.75516078E-11-0.25830859E+05 0.40660583E+02                   4
Ac5oBoC                    c   5h   7o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.27173121E+01 0.39598074E-01-0.15201675E-04 0.26419953E-08-0.17282623E-12    2
-0.20137664E+05 0.24050213E+02-0.80820575E-01 0.65871015E-01-0.58394176E-04    3
 0.26078968E-07-0.39273311E-11-0.21186844E+05 0.31828636E+02                   4
MeDc6oCoGrF 1/16/8 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    61
 2.33081886E+01 2.71908496E-02-9.44580419E-06 1.48180021E-09-8.65940105E-14    2
-3.36171206E+04-8.62333068E+01 1.05864410E+00 7.76450570E-02-5.36371806E-05    3
 1.94192229E-08-2.94502957E-12-2.56448662E+04 3.39576409E+01                   4
MeEc8e1oIqF                c   9h  16o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10624512E+02 0.70339017E-01-0.27066615E-04 0.47140674E-08-0.30894842E-12    2
-0.40464016E+05-0.66816635E+01-0.12321774E+01 0.11905866E+00-0.80887177E-04    3
 0.19484652E-07 0.18109936E-11-0.39143594E+05 0.47958569E+02                   4
MeEc8e1oIojF               c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10645637E+02 0.62892258E-01-0.23012659E-04 0.38662722E-08-0.24695461E-12    2
-0.21665713E+05-0.11961693E+02-0.39092231E+01 0.11855703E+00-0.86979904E-04    3
 0.27834156E-07-0.14069622E-11-0.19380795E+05 0.57199276E+02                   4
Bc6e5oA                    c   6h   9o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.97464819E+01 0.32964297E-01-0.11280594E-04 0.18081874E-08-0.11180028E-12    2
 0.17608750E+04-0.16850357E+02 0.98664396E-01 0.71078040E-01-0.64176245E-04    3
 0.33530611E-07-0.74144284E-11 0.35136250E+04 0.29380007E+02                   4
chxe1qC    1/16/ 8 THERMc   6h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    21
 2.26977624E+01 2.45875541E-02-8.61222159E-06 1.35866876E-09-7.97157873E-14    2
-2.38110330E+04-9.80202219E+01-5.94656732E+00 9.57611181E-02-7.76521986E-05    3
 3.23466289E-08-5.46902537E-12-1.42743036E+04 5.43342688E+01                   4
chxe1ojC   1/16/ 8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    01
 2.01595926E+01 2.12763022E-02-7.21846644E-06 1.11631559E-09-6.46434681E-14    2
-4.37846874E+03-8.66630027E+01-7.40791643E+00 8.85998174E-02-6.95760663E-05    3
 2.71090091E-08-4.17387106E-12 4.73212318E+03 6.00716879E+01                   4
chchhco    4/ 8/94 thermc   3h   3o   1    0G   300.000  5000.000 1402.000    11
 1.07482537e+01 6.19822688e-03-2.06130981e-06 3.14418872e-10-1.80309517e-14    2
 1.51410162e+04-3.01266033e+01 1.46654466e+00 3.23390476e-02-3.05588208e-05    3
 1.44081861e-08-2.65600505e-12 1.78850058e+04 1.80850321e+01                   4
c9e5oAqG                   c   9h  16o   30   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13245047E+02 0.65950409E-01-0.24893441E-04 0.42780308E-08-0.27779767E-12    2
-0.42082863E+05-0.20701035E+02 0.14317242E+01 0.11213510E+00-0.75634613E-04    3
 0.19362556E-07 0.95281346E-12-0.40465418E+05 0.34752575E+02                   4
c9e5oAojG                  c   9h  15o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12836902E+02 0.59303630E-01-0.21311334E-04 0.35386929E-08-0.22437422E-12    2
-0.23123902E+05-0.23614983E+02-0.10316404E+01 0.11015072E+00-0.78153811E-04    3
 0.24123185E-07-0.98448463E-12-0.20725512E+05 0.43088203E+02                   4
c7e2oAoG                   c   7h  10o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79212089E+01 0.51403597E-01-0.21269812E-04 0.38969539E-08-0.26462743E-12    2
-0.34692684E+05-0.31320572E+01 0.87239712E+00 0.70092104E-01-0.37266491E-04    3
 0.77032105E-08 0.21629167E-12-0.32703648E+05 0.33480259E+02                   4
c7e2oyAoG                  c   7h   9o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.92518444E+01 0.44949587E-01-0.17258169E-04 0.30008649E-08-0.19643355E-12    2
-0.17514369E+05-0.10789070E+02 0.22769399E+01 0.54375257E-01-0.76344777E-05    3
-0.17194985E-07 0.78766655E-11-0.15025854E+05 0.27868025E+02                   4
c7e2oAoyG                  c   7h   9o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10697187E+02 0.42007811E-01-0.15720369E-04 0.26847400E-08-0.17354244E-12    2
-0.17611848E+05-0.16154190E+02 0.14615675E+01 0.67035832E-01-0.40661253E-04    3
 0.13823443E-07-0.21927167E-11-0.14957450E+05 0.31877527E+02                   4
c7e1oAoG   1/16/ 8 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.44442321E+01 2.39598993E-02-8.29981084E-06 1.29964900E-09-7.58559167E-14    2
-4.06350266E+04-9.55839017E+01 2.29657489E+00 7.62341368E-02-5.59630975E-05    3
 2.13175441E-08-3.34010259E-12-3.29750251E+04 2.32101504E+01                   4
c7e1oAoyG  1/16/ 8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    51
```

```
 2.41004654E+01 2.17359725E-02-7.53977946E-06 1.18175384E-09-6.90211887E-14    2
-2.16838019E+04-9.20570436E+01 2.93706093E+00 7.22939844E-02-5.42772055E-05    3
 2.10902205E-08-3.35839615E-12-1.44345858E+04 2.12264515E+01                   4
Fc6e1oA   1/16/ 8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1401.000    41
 1.94825779E+01 2.04609394E-02-6.98143158E-06 1.08207976E-09-6.27053237E-14    2
-1.52198233E+03-7.06889980E+01 8.31951475E-01 6.74092582E-02-5.30715722E-05    3
 2.19470424E-08-3.70558312E-12 4.61640211E+03 2.82752092E+01                   4
Dc4e1oA   1/16/ 8 THERMc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1401.000    21
 1.30057441E+01 1.17139055E-02-4.00441930E-06 6.21427581E-10-3.60414205E-14    2
 6.69063694E+03-3.87926445E+01 1.20066989E+00 4.32107101E-02-3.70527394E-05    3
 1.66075970E-08-2.99891911E-12 1.04129656E+04 2.32413576E+01                   4
Fc9e1qEqG              c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1390.00     1
 3.93591724E+01 3.72547769E-02-1.29983284E-05 2.04522446E-09-1.19775397E-13    2
-3.22207464E+04-1.65186518E+02 1.17688962E+00 1.29317935E-01-9.94445621E-05    3
 3.96614671E-08-6.49158264E-12-1.91907134E+04 3.89567173E+01                   4
c9e1e6qE   1/16/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    81
 3.22973771E+01 3.64981554E-02-1.26480703E-05 1.98091959E-09-1.15630793E-13    2
-2.61257083E+04-1.35047130E+02-2.29560045E+00 1.22589471E-01-9.71270118E-05    3
 4.06562671E-08-7.00634374E-12-1.45267429E+04 4.90566057E+01                   4
c9e1e6ojE  1/16/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    61
 3.01744206E+01 3.19582542E-02-1.06519762E-05 1.62710897E-09-9.33981284E-14    2
-6.70848020E+03-1.25666039E+02-5.31269092E+00 1.22745732E-01-1.00452453E-04    3
 4.22430891E-08-7.13522523E-12 4.70620331E+03 6.19255656E+01                   4
c9e1e5qG   1/16/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    81
 3.22973771E+01 3.64981554E-02-1.26480703E-05 1.98091959E-09-1.15630793E-13    2
-2.61257083E+04-1.35047130E+02-2.29560045E+00 1.22589471E-01-9.71270118E-05    3
 4.06562671E-08-7.00634374E-12-1.45267429E+04 4.90566057E+01                   4
c9e1e5ojG  1/16/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    61
 3.01744206E+01 3.19582542E-02-1.06519762E-05 1.62710897E-09-9.33981284E-14    2
-6.70848020E+03-1.25666039E+02-5.31269092E+00 1.22745732E-01-1.00452453E-04    3
 4.22430891E-08-7.13522523E-12 4.70620331E+03 6.19255656E+01                   4
c7e2e6oA   1/16/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 2.18249371E+01 2.36901737E-02-8.12629263E-06 1.26430870E-09-7.34680476E-14    2
-1.67778123E+04-8.53783476E+01-1.66689122E+00 8.27435116E-02-6.62115780E-05    3
 2.77087352E-08-4.73149021E-12-9.01966907E+03 3.93364483E+01                   4
c7e2e6oyA  1/16/ 8 THERMc   7h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.07421594E+01 2.22208518E-02-7.55827032E-06 1.16907897E-09-6.76513259E-14    2
-3.88899938E+02-7.85581269E+01-3.94615835E+01 7.79230098E-02-6.53951627E-05    3
 2.89415528E-08-5.19353119E-12 6.35690923E+03 3.27789562E+01                   4
c5e2oA     1/16/ 8 THERMc   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.62678582E+01 1.87757882E-02-6.36676648E-06 9.82965890E-10-5.68154392E-14    2
-2.43494476E+04-5.82283686E+01-9.70270308E-01 6.20807630E-02-4.88773337E-05    3
 2.02753363E-08-3.44167365E-12-1.86594122E+04 3.32866831E+01                   4
c5e2oyA    1/16/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    21
 1.55342589E+01 1.69476795E-02-5.75332957E-06 8.88668155E-10-5.13733300E-14    2
-8.15030015E+03-5.34878644E+01 3.60400137E-01 5.69117096E-02-4.73557282E-05    3
 2.09633273E-08-3.77847993E-12-3.28996514E+03 2.64736227E+01                   4
EtDc7e1qEqHrI          c   9h  17o   40   0G   300.00   5000.00  1392.00     1
 4.04867395E+01 3.63434010E-02-1.26944543E-05 1.99890627E-09-1.17124167E-13    2
-3.23495502E+04-1.72646693E+02-2.59249496E+01 1.38892928E-01-1.14041457E-04    3
 4.85025339E-08-8.38900511E-12-1.88693791E+04 4.36862785E+01                   4
EtDc7e1e8qE 1/16/8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    81
 3.27728258E+01 3.60455169E-02-1.24816098E-05 1.95390016E-09-1.14016865E-13    2
-2.64103867E+04-1.38608117E+02-2.40859692E+00 1.23601713E-01-9.80216184E-05    3
 4.07924229E-08-6.96116141E-12-1.46562485E+04 4.85563597E+01                   4
EtDc7e1e8ojE   1/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    61
 2.84563813E+01 3.47363565E-02-1.18676173E-05 1.84104981E-09-1.06754567E-13    2
-6.19515368E+03-1.16918012E+02-2.89838203E+00 1.13200426E-01-8.85657203E-05    3
 3.64907107E-08-6.15735341E-12 4.19070624E+03 4.96555771E+01                   4
MeCc6oAoDrG 1/17/8 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.40212581E+01 2.56513193E-02-8.72734059E-06 1.35159469E-09-7.83262333E-14    2
```

```
-3.35305002E+04-8.98656415E+01 2.03333997E+00 7.52543534E-02-5.14830553E-05    3
 1.82349334E-08-2.67287092E-12-2.56749199E+04 2.89254994E+01                   4
pche3qF    1/17/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.16928192E+01 3.87840240E-02-1.34545363E-05 2.10880639E-09-1.23162528E-13    2
-3.80430168E+04-1.41199994E+02-7.28054551E+00 1.36269038E-01-1.09253323E-04    3
 4.58623629E-08-7.87796099E-12-2.50711164E+04 6.59635284E+01                   4
pche3ojF   1/17/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    21
 2.77237073E+01 3.69732856E-02-1.26249968E-05 1.95813144E-09-1.13536534E-13    2
-1.79709845E+04-1.21493464E+02-7.44385148E+00 1.23771570E-01-9.56203960E-05    3
 3.84190412E-08-6.28958410E-12-6.25939853E+03 6.56681252E+01                   4
MeEc8e5oArI 1/17/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.84813054E+01 3.46777535E-02-1.18438382E-05 1.83733318E-09-1.06549289E-13    2
-2.09293034E+04-1.16253929E+02-3.67851202E-01 1.03474411E-01-7.57808485E-05    3
 2.94338907E-08-4.75658433E-12-1.09820305E+04 3.83031587E+01                   4
EtDc7e4oIrA 1/17/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.76012379E+01 3.54718492E-02-1.22170463E-05 1.90554124E-09-1.10911559E-13    2
-1.35918592E+04-1.08711239E+02-7.44186139E-01 1.01064341E-01-7.09400715E-05    3
 2.62268737E-08-4.04564524E-12-3.60269285E+03 4.38815724E+01                   4
MeEc7e6e8oA 1/17/8 THERMc   8h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.44949689E+01 2.87021582E-02-9.77238946E-06 1.51245725E-09-8.75555906E-14    2
-1.94607624E+04-9.82670225E+01-4.42829945E-01 9.36704803E-02-7.69176506E-05    3
 3.38182556E-08-6.08886764E-12-1.13724420E+04 3.34494048E+01                   4
MeEc7e6e8oyA   1/8 THERMc   8h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.40783634E+01 2.65703091E-02-9.05065311E-06 1.40120820E-09-8.11345268E-14    2
-4.98388630E+02-9.43590509E+01 3.25269611E-01 8.88988885E-02-7.39087543E-05    3
 3.27793232E-08-5.93322309E-12 7.15673732E+03 3.09345326E+01                   4
MeCc6e3oArG 1/17/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.19554931E+01 2.63183839E-02-9.07280301E-06 1.41602356E-09-8.24568392E-14    2
-1.22224522E+04-8.43443297E+01-1.10681348E+00 8.21333661E-02-6.19507746E-05    3
 2.47278389E-08-4.09096199E-12-4.34509019E+03 3.89309487E+01                   4
MeCc6e1e7rF 1/17/8 THERMc   7h  11    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    31
 2.02689513E+01 2.46221115E-02-8.26918986E-06 1.26812740E-09-7.29455631E-14    2
 1.91639726E+04-7.80136968E+01-1.06428263E+00 8.01487063E-02-6.50180786E-05    3
 2.80621255E-08-4.94007626E-12 2.60231188E+04 3.45725976E+01                   4
MeCc5e4e5oA 1/17/8 THERMc   6h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1398.000    21
 1.81942746E+01 1.99612345E-02-6.83078135E-06 1.06071080E-09-6.15442760E-14    2
-1.08245587E+04-6.75897779E+01-1.38555648E+00 7.32073546E-02-6.41713293E-05    3
 2.95894578E-08-5.49120710E-12-4.70510641E+03 3.50204969E+01                   4
MeCc5e4e5oyA   1/8 THERMc   6h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    21
 1.77858221E+01 1.78153062E-02-6.10272660E-06 9.48332706E-10-5.50519870E-14    2
 8.13494031E+03-6.37270224E+01-6.20616524E+00 6.84413122E-02-6.11564692E-05    3
 2.85374968E-08-5.33101587E-12 1.38247392E+04 3.25218133E+01                   4
MeEc8e8oAqF 1/17/8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1390.000    91
 3.47245108E+01 3.67320708E-02-1.27672841E-05 2.00357561E-09-1.17114830E-13    2
-5.19973848E+04-1.45173857E+02 9.39345386E-01 1.19627826E-01-9.32182574E-05    3
 3.86197571E-08-6.63667579E-12-4.05035258E+04 3.51313006E+01                   4
MeEc8e8oAojF   1/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 3.07671912E+01 3.51053935E-02-1.20424085E-05 1.87338928E-09-1.08845582E-13    2
-3.19689497E+04-1.25647450E+02-2.41429746E-01 1.11909516E-01-8.69140855E-05    3
 3.58969652E-08-6.12713355E-12-1.15449384E+04 3.94942872E+01                   4
Ec6e5oA    1/17/ 8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    41
 1.85000430E+01 2.08999584E-02-7.06042588E-06 1.08801012E-09-6.28265148E-14    2
 5.22643676E+03-6.53251563E+01 2.81575416E+00 5.46750559E-02-3.40958341E-05    3
 1.06653771E-08-1.33340585E-12 1.09819461E+04 1.99652168E+01                   4
MeBc6e7oAoF 1/17/8 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 2.45794773E+01 2.30215530E-02-7.72122928E-06 1.18439509E-09-6.81844958E-14    2
-4.19453758E+04-9.72471848E+01 1.14027283E+00 8.15419595E-02-6.44701689E-05    3
 2.65222464E-08-4.43633645E-12-3.42099579E+04 2.72566546E+01                   4
MeBc6e7oAoyF   1/8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 2.40665318E+01 2.10320311E-02-7.05979855E-06 1.08356240E-09-6.24055503E-14    2
-2.29436367E+04-9.27932623E+01 1.93227053E+00 7.67037132E-02-6.14626617E-05    3
```

```
 2.55479816E-08-4.30540996E-12-1.56850451E+04 2.46250327E+01                   4
MeBc6e7oyAoF   1/8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.39771699E+01 2.09644190E-02-7.00475233E-06 1.07166272E-09-6.15786073E-14    2
-2.57893396E+04-9.32285909E+01 2.38586912E+00 7.66593439E-02-6.31809935E-05    3
 2.72133789E-08-4.74772021E-12-1.88258420E+04 2.08531637E+01                   4
MeBc5e6oArE 1/17/8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 1.96270298E+01 2.03550575E-02-6.86167715E-06 1.05525842E-09-6.08312945E-14    2
-3.02756424E+03-7.29242090E+01-3.12737788E-01 7.17788819E-02-5.86241683E-05    3
 2.50444557E-08-4.33600609E-12 3.39754889E+03 3.24216523E+01                   4
ic3h4hco   1/17/ 8 THERMc   4h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1399.000    11
 1.40604280E+01 1.13307608E-02-3.89312811E-06 6.06342361E-10-3.52591270E-14    2
-1.76348924E+03-4.91626736E+01-3.44717462E-01 5.14324499E-02-4.76723331E-05    3
 2.24907603E-08-4.19507269E-12 2.60413901E+03 2.59308713E+01                   4
EtDc7e1oIqE 1/17/8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1390.000    91
 3.44241874E+01 3.69151919E-02-1.28146179E-05 2.00932290E-09-1.17383344E-13    2
-5.18975873E+04-1.43928966E+02 9.59551458E-01 1.17674766E-01-8.93615862E-05    3
 3.59026719E-08-5.98932427E-12-4.04114907E+04 3.50874331E+01                   4
EtDc7e1oIojE   1/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 3.06008321E+01 3.50457079E-02-1.19796257E-05 1.85937247E-09-1.07864324E-13    2
-3.19110841E+04-1.25133092E+02-2.90691023E+01 1.10187831E-01-8.32286097E-05    3
 3.31495991E-08-5.44729386E-12-2.14409185E+04 3.97850447E+01                   4
MeCc6e5oAoG 1/17/8 THERMc   7h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 2.33974327E+01 2.41774000E-02-8.23711338E-06 1.27635462E-09-7.39786834E-14    2
-3.87242515E+04-8.96416345E+01 1.00777248E+00 7.60288769E-02-5.39818439E-05    3
 1.96158942E-08-2.90026317E-12-3.09251340E+04 3.07317722E+01                   4
MeCc6e5oyAoG   1/8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 2.30578700E+01 2.19212808E-02-7.46183212E-06 1.15581050E-09-6.69837381E-14    2
-1.97918240E+04-8.61649724E+01 1.77773086E+00 7.12199790E-02-5.08519851E-05    3
 1.84537717E-08-2.70913334E-12-1.23956928E+04 2.82130739E+01                   4
MeCc6e5oAoyG   1/8 THERMc   7h   9o   2    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 2.30578700E+01 2.19212808E-02-7.46183212E-06 1.15581050E-09-6.69837381E-14    2
-1.97918240E+04-8.61649724E+01 1.77773086E+00 7.12199790E-02-5.08519851E-05    3
 1.84537717E-08-2.70913334E-12-1.23956928E+04 2.82130739E+01                   4
MeBc5e4oArF 1/17/8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 1.84111923E+01 2.16872149E-02-7.47510203E-06 1.16655366E-09-6.79257940E-14    2
 1.68610749E+02-6.52077437E+01-1.45768238E-02 6.43967262E-02-4.54498481E-05    3
 1.66229776E-08-2.50079113E-12 6.61616799E+03 3.38937104E+01                   4
Cc6e5oA    7/ 2/ 7 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    31
 1.87533632E+01 2.11438984E-02-7.15428106E-06 1.10383345E-09-6.38003382E-14    2
-6.85142738E+03-7.01438364E+01 7.30435734E-01 6.14568820E-02-4.11029744E-05    3
 1.39464686E-08-1.91355310E-12-4.18597373E+02 2.72797378E+01                   4
Dc7oAoC    1/18/ 8 THERMc   7h  11o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.44327962E+01 2.64363956E-02-9.13721303E-06 1.42869352E-09-8.33050628E-14    2
-3.56294216E+04-9.40950496E+01 6.57396611E-01 8.30829165E-02-6.17838911E-05    3
 2.41794886E-08-3.92568436E-12-2.74200538E+04 3.33088350E+01                   4
c3h7chco   1/18/ 8 THERMc   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1401.000    31
 1.66400286E+01 1.82656471E-02-6.23686766E-06 9.67103618E-10-5.60585369E-14    2
-2.24862541E+04-5.93438604E+01-6.48749093E-02 6.10454983E-02-4.91956332E-05    3
 2.09104480E-08-3.62555606E-12-1.70447576E+04 2.90646928E+01                   4
EtDc7e9oAqC 1/18/8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1391.000    91
 3.44355711E+01 3.69019720E-02-1.28091208E-05 2.00835516E-09-1.17322173E-13    2
-5.17700184E+04-1.43986645E+02 5.41821199E-01 1.19658664E-01-9.24185004E-05    3
 3.78212231E-08-6.41400472E-12-4.02258880E+04 3.69957517E+01                   4
EtDc7e9oAojC   1/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    71
 3.03087537E+01 3.55777464E-02-1.22219983E-05 1.90302222E-09-1.10631586E-13    2
-3.16888133E+04-1.23527800E+02-7.11268626E-02 1.09521265E-01-8.27352151E-05    3
 3.31902972E-08-5.51990433E-12-2.13553422E+04 3.87106474E+01                   4
c9e5oAqC   1/18/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.39312274E+01 3.73574775E-02-1.29722436E-05 2.03444078E-09-1.18866229E-13    2
-5.20246429E+04-1.40078657E+02 1.17186763E+00 1.15525209E-01-8.62272980E-05    3
 3.41637904E-08-5.64903299E-12-4.06704009E+04 3.55163078E+01                   4
```

```
c9e5oAojC  1/18/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 3.00463394E+01 3.55992989E-02-1.21876557E-05 1.89352726E-09-1.09918187E-13    2
-3.20175670E+04-1.20944051E+02-4.69762718E-03 1.07764218E-01-7.97751951E-05    3
 3.12787248E-08-5.09016175E-12-2.17121812E+04 3.98627947E+01                   4
MeCc6e1oG  1/18/ 8 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.18619802E+01 2.84078258E-02-9.76869657E-06 1.52207654E-09-8.85285151E-14    2
-2.88909430E+04-8.48257214E+01-5.05639186E-03 7.69868435E-02-5.04951548E-05    3
 1.68972221E-08-2.30215819E-12-2.10185781E+04 3.35482225E+01                   4
MeCc6e1oyG 1/18/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.14454572E+01 2.62774161E-02-9.04782940E-06 1.41100489E-09-8.21195567E-14    2
-9.92899171E+03-8.09188687E+01 7.80030058E-01 7.21413003E-02-4.73769918E-05    3
 1.57923406E-08-2.13240959E-12-2.49201823E+03 3.09543127E+01                   4
c7e3oyA    1/18/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.10831418E+01 2.66019968E-02-9.16380795E-06 1.42954892E-09-8.32178458E-14    2
-9.77927659E+03-7.76921829E+01-1.52317695E-01 7.47318523E-02-5.08894888E-05    3
 1.79844952E-08-2.63003828E-12-2.21165634E+03 3.69554199E+01                   4
AmchqBqD   1/22/ 8 THERMc   7h  13o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 3.46494460E+01 2.93154055E-02-1.04458153E-05 1.66690197E-09-9.85830072E-14    2
-3.67680086E+04-1.58031448E+02-6.03232417E+00 1.25011002E-01-9.62624512E-05    3
 3.66290048E-08-5.56798607E-12-2.27959171E+04 6.00772583E+01                   4
mche1qD    1/22/ 8 THERMc   7h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 2.55860139E+01 2.94860536E-02-1.02358822E-05 1.60512292E-09-9.37800074E-14    2
-2.84544861E+04-1.12003044E+02-5.48018824E+00 1.07034255E-01-8.59044429E-05    3
 3.57773769E-08-6.06892843E-12-1.81393926E+04 5.31176204E+01                   4
mche1ojD   1/22/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1400.000    01
 2.16222812E+01 2.78465945E-02-9.50326912E-06 1.47343441E-09-8.54129354E-14    2
-8.41369543E+03-9.24157313E+01-6.47927687E+00 9.85674371E-02-7.85185257E-05    3
 3.23806082E-08-5.40800171E-12 7.89997118E+02 5.66261734E+01                   4
MeEc6e5oArG 1/22/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 2.25131482E+01 2.53154662E-02-8.61658001E-06 1.33385251E-09-7.72450673E-14    2
-1.14157456E+04-8.79059779E+01 5.73289419E-01 7.83180939E-02-5.86062870E-05    3
 2.32338403E-08-3.81747502E-12-3.92812323E+03 2.93785514E+01                   4
MeCc6e7oArF 1/22/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    51
 2.15552436E+01 2.62400808E-02-9.04687582E-06 1.41206219E-09-8.22287835E-14    2
-4.04863895E+03-7.99301388E+01 1.36191966E-01 7.62178268E-02-5.43014084E-05    3
 2.04116971E-08-3.20048289E-12 3.45957934E+03 3.52314020E+01                   4
MeCc4e3oArE 1/22/8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1373.000    21
 1.93658337E+01 1.23724749E-02-4.45521604E-06 7.15900963E-10-4.25435352E-14    2
-4.09107709E+03-7.51475312E+01 4.63195582E-01 5.45055546E-02-3.90699102E-05    3
 1.30893214E-08-1.65179576E-12 2.59079415E+03 2.69516352E+01                   4
c9e1oFqD   1/22/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1388.000    91
 3.38025462E+01 3.75519034E-02-1.30576593E-05 2.04964384E-09-1.19825800E-13    2
-5.44635558E+04-1.39424045E+02 1.69541833E+00 1.15007098E-01-8.72681789E-05    3
 3.56170775E-08-6.09884268E-12-4.33485179E+04 3.24956429E+01                   4
c9e1oFojD  1/22/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.99400700E+01 3.57429973E-02-1.22485190E-05 1.90416085E-09-1.10581822E-13    2
-3.44613876E+04-1.20409488E+02 3.68299040E-01 1.07860632E-01-8.16599044E-05    3
 3.32024663E-08-5.63337310E-12-2.43661547E+04 3.75502391E+01                   4
pche6qD    1/22/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 3.21945289E+01 3.81278576E-02-1.32730771E-05 2.08530159E-09-1.21993499E-13    2
-3.89632774E+04-1.45276620E+02-6.30362428E+00 1.31283459E-01-1.01037253E-04    3
 4.03697791E-08-6.61511605E-12-2.58674404E+04 6.04223021E+01                   4
pche6ojD   1/22/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    31
 2.81835424E+01 3.66125216E-02-1.26006187E-05 1.96471338E-09-1.14339066E-13    2
-1.89208105E+04-1.25462844E+02-7.35440100E+00 1.23039179E-01-9.40305880E-05    3
 3.72807861E-08-6.03851475E-12-6.92974874E+03 6.41733074E+01                   4
Ac9e2oF    1/22/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    61
 2.75603557E+01 3.51200650E-02-1.19339601E-05 1.84586514E-09-1.06851584E-13    2
-2.43297128E+04-1.11604983E+02 4.08804598E-01 9.55441481E-02-6.31480365E-05    3
 2.16795166E-08-3.09204114E-12-1.45263799E+04 3.54090343E+01                   4
Ac9e3oF    1/22/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
```

```
 2.69796725E+01 3.60941888E-02-1.24520618E-05 1.94429910E-09-1.13250776E-13    2
-1.56603282E+04-1.04951279E+02-7.15594414E-01 1.00202922E-01-7.04580714E-05    3
 2.65106160E-08-4.21627472E-12-5.83735660E+03 4.42438047E+01                   4
Ac7e1oD    1/22/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.12133027E+01 2.66192541E-02-9.19647902E-06 1.43730577E-09-8.37730259E-14    2
-1.06370885E+03-7.82218671E+01 3.90026555E-01 7.60627605E-02-5.56462107E-05    3
 2.20224848E-08-3.68416204E-12 6.22306901E+03 3.35557913E+01                   4
Ic9e3oA    1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.74032165E+01 3.56045987E-02-1.22554498E-05 1.91080229E-09-1.11189350E-13    2
-1.18686793E+04-1.08001986E+02-5.10895054E-01 9.89415837E-02-6.73224866E-05    3
 2.38662409E-08-3.51161260E-12-1.91948810E+03 4.26919944E+01                   4
Gc7e3oA    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.10678286E+01 2.66193759E-02-9.17059929E-06 1.43067828E-09-8.32859754E-14    2
-3.67286572E+03-7.68313448E+01-1.40401729E-01 7.49051730E-02-5.13606596E-05    3
 1.83619241E-08-2.72583052E-12 3.87013180E+03 3.76035229E+01                   4
Ic9e4oA    1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.76285486E+01 3.49255658E-02-1.19188653E-05 1.84803268E-09-1.07133722E-13    2
-1.23933788E+04-1.08936941E+02 6.17447216E-01 9.61516233E-02-6.50151955E-05    3
 2.29361898E-08-3.35854706E-12-2.76954105E+03 3.68896249E+01                   4
MeDc8e9oArH 1/23/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.80030490E+01 3.47386613E-02-1.18805763E-05 1.84456305E-09-1.07026342E-13    2
-1.27296155E+04-1.11412234E+02 9.01648300E-01 9.74749534E-02-6.80845196E-05    3
 2.51531376E-08-3.88598764E-12-3.18200566E+03 3.44753191E+01                   4
MeDc6e7oArF 1/23/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    51
 2.17689222E+01 2.55765411E-02-8.71701839E-06 1.35049682E-09-7.82498022E-14    2
-4.56972147E+03-8.07999448E+01 1.31453082E+00 7.31997238E-02-5.16663724E-05    3
 1.92890450E-08-3.00698919E-12 2.60222605E+03 2.91992473E+01                   4
Dc5e4oA    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1375.000    31
 1.52417047E+01 1.65961102E-02-5.60640353E-06 8.64059112E-10-4.99029144E-14    2
 9.34652679E+03-4.92605623E+01 3.11275589E+00 4.21860917E-02-2.54886635E-05    3
 7.61300970E-09-8.92609097E-13 1.38593978E+04 1.68993250E+01                   4
EtDc7e9oArG 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.78871164E+01 3.48897522E-02-1.19434139E-05 1.85541677E-09-1.07698428E-13    2
-1.20556961E+04-1.11486098E+02 3.82669315E-01 9.86468468E-02-6.90522634E-05    3
 2.54844674E-08-3.92135706E-12-2.38699829E+03 3.65190823E+01                   4
Gc7e4oA    1/25/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 2.14668050E+01 2.56536183E-02-8.70917982E-06 1.34609159E-09-7.78768806E-14    2
-4.26415898E+03-7.87347276E+01 1.06457910E+00 7.16997508E-02-4.82810948E-05    3
 1.68416189E-08-2.42336894E-12 3.00996795E+03 3.14589622E+01                   4
Ec5e4oA    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    31
 1.57433698E+01 1.61784999E-02-5.46428086E-06 8.42080578E-10-4.86316494E-14    2
 1.02963886E+04-5.22903256E+01 2.26384712E+00 4.71093521E-02-3.27391557E-05    3
 1.19096892E-08-1.79939914E-12 1.50568678E+04 2.03429136E+01                   4
MeDc6e5oArG 1/23/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.16305509E+01 2.57601371E-02-8.79326865E-06 1.36361484E-09-7.90588687E-14    2
-3.88575338E+03-8.07458501E+01 7.64130350E-01 7.45179565E-02-5.28670480E-05    3
 1.97729965E-08-3.07707005E-12 3.40187013E+03 3.13874797E+01                   4
Dc9e8oA    1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1376.000    71
 2.83354281E+01 3.33963756E-02-1.12125174E-05 1.72115972E-09-9.91347659E-14    2
-1.26138674E+04-1.12795370E+02 1.68734650E+00 8.94937303E-02-5.34371686E-05    3
 1.47945147E-08-1.39753440E-12-2.81934395E+03 3.23825968E+01                   4
EtDc7e6oArI 1/23/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.81880065E+01 3.43689381E-02-1.17103702E-05 1.81388974E-09-1.05084674E-13    2
-1.22904305E+04-1.13157023E+02 3.46513884E-01 9.85099773E-02-6.83736129E-05    3
 2.47522225E-08-3.70466931E-12-2.50060406E+03 3.67417662E+01                   4
Dc7e6oA    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1373.000    51
 2.16461497E+01 2.50734822E-02-8.42756023E-06 1.29463237E-09-7.46068729E-14    2
-4.30739533E+03-7.97028069E+01 2.26304812E+00 6.46648821E-02-3.65860801E-05    3
 9.02287721E-09-6.08247739E-13 2.93698457E+03 2.63240264E+01                   4
Gc7e1oE    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1380.000    51
 2.16249765E+01 2.54055412E-02-8.60634797E-06 1.32882865E-09-7.68401496E-14    2
-6.82065235E+03-7.97027183E+01 1.54075074E+00 7.12233754E-02-4.90687345E-05    3
 1.79360855E-08-2.76043941E-12 3.42540498E+02 2.86874923E+01                   4
Ic9e3oB    1/23/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.76173766E+01 3.57190583E-02-1.23600652E-05 1.93388004E-09-1.12805003E-13    2
-1.82297947E+04-1.10234251E+02-4.65524904E-01 9.91833888E-02-6.75589227E-05    3
 2.40906759E-08-3.59170193E-12-8.15747962E+03 4.15245879E+01                   4
Gc7e3oB    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    51
 2.13190845E+01 2.66909913E-02-9.25815025E-06 1.45087176E-09-8.47252979E-14    2
-1.00457003E+04-7.92710828E+01-2.98009342E-01 7.61404797E-02-5.31184119E-05    3
 1.95337240E-08-3.01470891E-12-2.33983283E+03 3.73560498E+01                   4
MeDc8e9oBrH 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.75823304E+01 3.56391742E-02-1.23081841E-05 1.92324360E-09-1.12082838E-13    2
-1.60037218E+04-1.09065854E+02-7.55864372E-01 1.00657501E-01-7.00070507E-05    3
 2.56376586E-08-3.92808866E-12-5.94357202E+03 4.37158521E+01                   4
MeDc6e7oBrF 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.12581554E+01 2.66328317E-02-9.21358509E-06 1.44134938E-09-8.40665803E-14    2
-7.80880527E+03-7.79512622E+01-4.07081933E-01 7.67501480E-02-5.42506990E-05    3
 2.02570537E-08-3.16818041E-12-1.51632128E+02 3.87206929E+01                   4
Dc5e4oB    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 1.45037888E+01 1.79639203E-02-6.22913661E-06 9.75993112E-10-5.69865712E-14    2
 6.21008848E+03-4.51075397E+01 1.26960339E+00 4.63569889E-02-2.91949538E-05    3
 9.38407324E-09-1.24591650E-12 1.11226148E+04 2.69714136E+01                   4
Ic9e4oB    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.70702212E+01 3.60461782E-02-1.24428085E-05 1.94368953E-09-1.13251406E-13    2
-1.56173152E+04-1.05822999E+02-9.48867004E-01 9.89841231E-02-6.65713594E-05    3
 2.33055792E-08-3.39531527E-12-5.54575149E+03 4.56996355E+01                   4
EtDc7e9oBrG 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.74207699E+01 3.55716688E-02-1.22398603E-05 1.90790813E-09-1.11001535E-13    2
-1.57629963E+04-1.08579686E+02 9.45284085E-02 9.80778340E-02-6.75370200E-05    3
 2.45753090E-08-3.75225167E-12-6.03683935E+03 3.88243929E+01                   4
Gc7e4oB    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.07390255E+01 2.70515980E-02-9.35350297E-06 1.46274662E-09-8.52954844E-14    2
-7.42136205E+03-7.46721116E+01-5.84203026E-01 7.49890071E-02-5.06793226E-05    3
 1.78437049E-08-2.61835626E-12 2.44307886E+02 4.06348097E+01                   4
Ec5e4oB    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.50107659E+01 1.75254134E-02-6.07623002E-06 9.51963051E-10-5.55810889E-14    2
 7.16252705E+03-4.81564844E+01 4.28426130E-01 5.12607427E-02-3.64206500E-05    3
 1.36557347E-08-2.14448770E-12 1.23184732E+04 3.03758697E+01                   4
MeDc6e5oBrG 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.10968190E+01 2.65567386E-02-9.14055564E-06 1.42510691E-09-8.29257744E-14    2
-7.56928396E+03-7.74671933E+01 4.59482249E-01 7.40544670E-02-5.15832183E-05    3
 1.90622263E-08-2.96162808E-12-2.46061674E+02 3.37640187E+01                   4
Dc9e8oB    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1374.000    71
 2.80186574E+01 3.38388069E-02-1.14026003E-05 1.75466708E-09-1.01239117E-13    2
-1.63749681E+04-1.10725173E+02 1.19864307E+00 8.97143000E-02-5.28747290E-05    3
 1.43261224E-08-1.29891419E-12-6.43690160E+03 3.56338120E+01                   4
EtDc7e6oBrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.76507513E+01 3.51612723E-02-1.20538353E-05 1.87448549E-09-1.08885624E-13    2
-1.59685705E+04-1.09851518E+02-1.45654782E-02 9.82872463E-02-6.74262977E-05    3
 2.42299642E-08-3.62636701E-12-6.13979377E+03 3.93814106E+01                   4
Dc7e6oB    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1372.000    51
 2.13122865E+01 2.54793398E-02-8.59416716E-06 1.32337702E-09-7.63904410E-14    2
-8.04670949E+03-7.74976609E+01 1.78161805E+00 6.48884895E-02-3.61027750E-05    3
 8.60477314E-09-5.17178369E-13-6.82273320E+02 2.95359832E+01                   4
MeDc8e7oBrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.76507513E+01 3.51612723E-02-1.20538353E-05 1.87448549E-09-1.08885624E-13    2
-1.59685705E+04-1.09851518E+02-1.45654782E-02 9.82872463E-02-6.74262977E-05    3
 2.42299642E-08-3.62636701E-12-6.13979377E+03 3.93814106E+01                   4
MeDc8e9oCrH 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.79936865E+01 3.52120429E-02-1.21424305E-05 1.89535545E-09-1.10374374E-13    2
-1.78590802E+04-1.12352624E+02 1.55351515E-01 1.01391194E-01-7.40800939E-05    3
```

```
 2.90989537E-08-4.80895280E-12-8.16092770E+03 3.69930363E+01                   4
MeCc6e7oDrA 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.16559748E+01 2.62261536E-02-9.05684802E-06 1.41507124E-09-8.24600061E-14    2
-9.66227361E+03-8.11676453E+01 5.38824472E-01 7.72954503E-02-5.80392416E-05    3
 2.35504305E-08-4.01423566E-12-2.37315556E+03 3.18451627E+01                   4
Bc5e1oC    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1382.000    21
 1.49916769E+01 1.80169437E-02-6.25611084E-06 9.81044881E-10-5.73127293E-14    2
-4.86264792E+02-4.92310361E+01 3.23983415E+00 4.28535315E-02-2.64504470E-05    3
 8.67499058E-09-1.23911835E-12 3.97958374E+03 1.50188933E+01                   4
eche1oD    1/24/ 8 THERMc   8h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    11
 2.28951289E+01 3.19941037E-02-1.10554273E-05 1.72822760E-09-1.00750729E-13    2
-3.10194670E+04-9.80687856E+01-6.14245216E+00 1.01684231E-01-7.61542619E-05    3
 2.98988477E-08-4.84564793E-12-2.10706432E+04 5.73070282E+01                   4
c9e6oyA    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.76387535E+01 3.49211124E-02-1.19183338E-05 1.84806029E-09-1.07139996E-13    2
-1.84989265E+04-1.09771899E+02 6.09356016E-01 9.59639588E-02-6.45261240E-05    3
 2.25531854E-08-3.26273833E-12-8.85197914E+03 3.62232601E+01                   4
Ic9e3oE    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.74949896E+01 3.57605696E-02-1.23597173E-05 1.93222949E-09-1.12642126E-13    2
-1.82475442E+04-1.09145338E+02 3.74143422E-02 9.92696905E-02-6.98763947E-05    3
 2.63627271E-08-4.21156354E-12-8.49126519E+03 3.88080570E+01                   4
Hc8h15-3   1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.35136685E+01 3.37288193E-02-1.14970987E-05 1.78091793E-09-1.03163246E-13    2
 1.30454290E+03-9.16472242E+01-1.63061239E+00 9.08820010E-02-6.10884167E-05    3
 2.14089305E-08-3.10298535E-12 1.02319783E+04 4.40166630E+01                   4
Ac7e4oC    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    51
 2.00481096E+01 2.57409047E-02-8.49560831E-06 1.28762843E-09-7.34632712E-14    2
-7.48022865E+03-8.07975415E+01 2.65201995E-01 7.69619980E-02-6.06229821E-05    3
 2.58348866E-08-4.52776588E-12-1.08557699E+03 2.37149955E+01                   4
Ic9e4oC    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.74949896E+01 3.57605696E-02-1.23597173E-05 1.93222949E-09-1.12642126E-13    2
-1.82475442E+04-1.09145338E+02 3.74143422E-02 9.92696905E-02-6.98763947E-05    3
 2.63627271E-08-4.21156354E-12-8.49126519E+03 3.88080570E+01                   4
EtDc7e9oCrH 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.73963208E+01 3.58069108E-02-1.23670192E-05 1.93243390E-09-1.12615214E-13    2
-1.62754870E+04-1.08376060E+02-6.40137862E-01 1.01317179E-01-7.22628975E-05    3
 2.75464912E-08-4.42233958E-12-6.40368750E+03 4.24207819E+01                   4
Gc7e4oC    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.11655002E+01 2.67595219E-02-9.26719261E-06 1.45069070E-09-8.46480252E-14    2
-1.00529625E+04-7.80046244E+01 4.13746135E-01 7.52020743E-02-5.38655848E-05    3
 2.08230439E-08-3.41688550E-12-2.70236612E+03 3.36937419E+01                   4
Ac5e1oC    1/23/ 8 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1035.000    51
 1.23260482E+01 3.60790879E-02-1.07903338E-05 9.49610949E-10 7.11959879E-15    2
 5.73120164E+03-3.69358192E+01-1.86614232E+01 1.58271871E-01-1.84090954E-04    3
 1.10294908E-07-2.70705354E-11 1.14653088E+04 1.11893541E+02                   4
MeCc6e1oDrG 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 2.10748427E+01 2.67856111E-02-9.26460496E-06 1.44905483E-09-8.45021450E-14    2
-8.08304757E+03-7.72784078E+01-3.16015369E-01 7.74586173E-02-5.65431255E-05    3
 2.21716950E-08-3.66098039E-12-6.06252878E+02 3.75531495E+01                   4
Ac9e6oB    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.84634282E+01 3.47459749E-02-1.18790299E-05 1.84403615E-09-1.06988432E-13    2
-1.98492867E+04-1.15212700E+02-7.18587254E-01 1.03849300E-01-7.53910500E-05    3
 2.88638953E-08-4.58719088E-12-9.75409275E+03 4.12742454E+01                   4
Gc7h13-3   1/24/ 8 THERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.02595343E+01 2.94019199E-02-1.00312524E-05 1.55475333E-09-9.00969885E-14    2
 5.42336436E+03-7.56005591E+01-1.28816625E+00 7.82039641E-02-5.22552162E-05    3
 1.82427873E-08-2.64174309E-12 1.31025026E+04 4.07391378E+01                   4
Ac9e6oD    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.69796725E+01 3.60941888E-02-1.24520618E-05 1.94429910E-09-1.13250776E-13    2
-1.56603282E+04-1.04951279E+02-7.15594414E-01 1.00202922E-01-7.04580714E-05    3
 2.65106160E-08-4.21627472E-12-5.83735660E+03 4.42438047E+01                   4
```

```
Ac7e4oB    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    41
 2.19747711E+01 2.63086476E-02-9.07150464E-06 1.41608285E-09-8.24723916E-14    2
-1.11514168E+04-8.34989852E+01-1.48818913E+00 8.26348148E-02-6.17199925E-05    3
 2.42210053E-08-3.92812284E-12-3.11235934E+03 4.20453962E+01                   4
EtDc7e6oCrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.75558658E+01 3.54907381E-02-1.22192430E-05 1.90543615E-09-1.10887363E-13    2
-1.59269084E+04-1.09243329E+02-8.67767938E-01 1.02070702E-01-7.29821349E-05    3
 2.77153788E-08-4.40733673E-12-5.97074623E+03 4.35184767E+01                   4
Dc9e8oC    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    61
 2.92403819E+01 3.35344579E-02-1.13520325E-05 1.75139632E-09-1.01204126E-13    2
-1.87472318E+04-1.19916098E+02 4.96217372E-02 1.03875619E-01-7.74698653E-05    3
 3.06124203E-08-5.01484460E-12-8.77140583E+03 3.61871767E+01                   4
Dc7e1oE    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    41
 2.28850181E+01 2.46240719E-02-8.30820876E-06 1.27942954E-09-7.38514683E-14    2
-1.05591936E+04-8.86633624E+01 6.31920283E-01 7.89136754E-02-6.01855650E-05    3
 2.43575964E-08-4.07914163E-12-3.01407020E+03 3.01154268E+01                   4
eche1oF    1/24/ 8 THERMc   8h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1385.000    11
 2.37156302E+01 3.02780430E-02-1.02598619E-05 1.58450345E-09-9.16420462E-14    2
-3.08640689E+04-1.02296953E+02-5.08929091E+00 9.88733966E-02-7.32504548E-05    3
 2.81693175E-08-4.43961119E-12-2.10003074E+04 5.19293489E+01                   4
Ac9e6oC    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    71
 2.75654649E+01 3.47584146E-02-1.18198072E-05 1.82882293E-09-1.05880704E-13    2
-1.63059878E+04-1.07858716E+02 4.86390089E-01 9.68892586E-02-6.69993551E-05    3
 2.45681502E-08-3.78452680E-12-6.69439268E+03 3.81352101E+01                   4
MeDc8e7oCrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.75558658E+01 3.54907381E-02-1.22192430E-05 1.90543615E-09-1.10887363E-13    2
-1.59269084E+04-1.09243329E+02-8.67767938E-01 1.02070702E-01-7.29821349E-05    3
 2.77153788E-08-4.40733673E-12-5.97074623E+03 4.35184767E+01                   4
MeEc8e9oDrA 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.79936865E+01 3.52120429E-02-1.21424305E-05 1.89535545E-09-1.10374374E-13    2
-1.78590802E+04-1.12352624E+02 1.55351515E-01 1.01391194E-01-7.40800939E-05    3
 2.90989537E-08-4.80895280E-12-8.16092770E+03 3.69930363E+01                   4
MeCc6e7oBrA 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    41
 2.30205831E+01 2.54165057E-02-8.76216288E-06 1.36757164E-09-7.96367737E-14    2
-1.33672349E+04-9.10966712E+01-8.20190991E-01 8.47679172E-02-6.67363894E-05    3
 2.76697221E-08-4.71062015E-12-5.40670777E+03 3.57239906E+01                   4
mche1oD    1/24/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    01
 2.01697645E+01 2.65092845E-02-9.03743820E-06 1.40028948E-09-8.11375852E-14    2
-2.69338657E+04-8.35191285E+01-3.58892664E+00 8.37547755E-02-6.23297779E-05    3
 2.41973596E-08-3.85119606E-12-1.88665907E+04 4.34460939E+01                   4
MeEc8e9oCrA 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.74600798E+01 3.57065818E-02-1.23224287E-05 1.92445256E-09-1.12109753E-13    2
-1.60308232E+04-1.08001829E+02-3.52101941E-01 1.01105648E-01-7.27843828E-05    3
 2.81740647E-08-4.60435534E-12-6.26030384E+03 4.14747219E+01                   4
MeEc8e9oyA 1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.80153159E+01 3.47306690E-02-1.18784705E-05 1.84431131E-09-1.07015089E-13    2
-1.88358768E+04-1.12258554E+02 8.94023311E-01 9.72842670E-02-6.75886667E-05    3
 2.47642144E-08-3.78856156E-12-9.26449742E+03 3.38069467E+01                   4
MeCc6e7oyA 1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    51
 2.15696479E+01 2.62260606E-02-9.04179371E-06 1.41125528E-09-8.21816272E-14    2
-1.01552444E+04-8.07872190E+01 1.22030884E-01 7.60540809E-02-5.38446903E-05    3
 2.00447643E-08-3.10739109E-12-2.62185676E+03 3.45937909E+01                   4
MeBc5e1rF  1/24/ 8 THERMc   6h  11    0    0G   300.000  5000.000 1395.000    31
 1.82026718E+01 2.44812048E-02-8.35996384E-06 1.29643763E-09-7.51546950E-14    2
 2.33876532E+03-6.95575445E+01-1.47932805E+00 7.22802333E-02-5.37942381E-05    3
 2.13741487E-08-3.53072969E-12 9.04209177E+03 3.55846172E+01                   4
MeDc7e8rA  1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 2.39346860E+01 3.34622778E-02-1.14237113E-05 1.77127107E-09-1.02670849E-13    2
 9.50665421E+02-9.43797351E+01-1.24548629E+00 9.17390575E-02-6.34283865E-05    3
 2.31490754E-08-3.52127185E-12 9.80459419E+03 4.11379259E+01                   4
mche1oE    1/24/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    01
```

```
 2.07629532E+01 2.52877789E-02-8.47681615E-06 1.29974475E-09-7.48000483E-14    2
-2.76203475E+04-8.65483538E+01-2.11957385E+00 7.93172621E-02-5.72984839E-05    3
 2.14180492E-08-3.26730030E-12-1.97657027E+04 3.60864151E+01                   4
MeEc8e9oBrH 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.75254751E+01 3.54354132E-02-1.21828876E-05 1.89801539E-09-1.10386263E-13    2
-1.64313423E+04-1.08440996E+02 5.74140762E-01 9.70841037E-02-6.68413922E-05    3
 2.44145535E-08-3.75446204E-12-6.82594357E+03 3.69624675E+01                   4
Ac9e5oC    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.69796725E+01 3.60941888E-02-1.24520618E-05 1.94429910E-09-1.13250776E-13    2
-1.56603282E+04-1.04951279E+02-7.15594414E-01 1.00202922E-01-7.04580714E-05    3
 2.65106160E-08-4.21627472E-12-5.83735660E+03 4.42438047E+01                   4
MeEc6e5oBrG 1/24/8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 2.18152942E+01 2.63955791E-02-9.09023823E-06 1.41779213E-09-8.25213692E-14    2
-1.50426859E+04-8.37223455E+01 3.13380268E-01 7.77345889E-02-5.73228673E-05    3
 2.26612866E-08-3.75784315E-12-7.58430278E+03 3.15348760E+01                   4
Ac9e5oD    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.74949896E+01 3.57605696E-02-1.23597173E-05 1.93222949E-09-1.12642126E-13    2
-1.82475442E+04-1.09145338E+02 3.74143422E-02 9.92696905E-02-6.98763947E-05    3
 2.63627271E-08-4.21156354E-12-8.49126519E+03 3.88080570E+01                   4
Ac7e3oB    1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.25316773E+01 2.59650419E-02-8.98120420E-06 1.40489483E-09-8.19375493E-14    2
-1.37600082E+04-8.79489331E+01-1.04100436E+00 8.31434162E-02-6.32874906E-05    3
 2.54064976E-08-4.21836998E-12-5.72267942E+03 3.80065544E+01                   4
EtDc7e1oCrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.83661162E+01 3.51125251E-02-1.21575363E-05 1.90297923E-09-1.11035066E-13    2
-1.81887474E+04-1.15453364E+02-2.50103390E+00 1.09477970E-01-8.24469681E-05    3
 3.29086562E-08-5.45954568E-12-7.58616849E+03 4.97041953E+01                   4
Dc7e1oC    1/23/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.21943129E+01 2.62103676E-02-8.96188910E-06 1.39098413E-09-8.06844384E-14    2
-1.24040053E+04-8.60120444E+01 1.05310053E-01 8.19587294E-02-6.46866529E-05    3
 2.74153729E-08-4.80345154E-12-5.05697958E+03 3.13003989E+01                   4
EtDc7e9oyA 1/25/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.78998178E+01 3.48812212E-02-1.19410924E-05 1.85512889E-09-1.07684989E-13    2
-1.81621478E+04-1.12334905E+02 3.76106283E-01 9.84513479E-02-6.85486971E-05    3
 2.50904988E-08-3.82278166E-12-8.46965149E+03 3.58457935E+01                   4
EtCc6e1rH  1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.38461196E+01 3.36012356E-02-1.14853528E-05 1.78229044E-09-1.03368100E-13    2
 1.60393074E+03-9.46292141E+01-1.70966538E+00 9.26426497E-02-6.39663378E-05    3
 2.32202015E-08-3.50297681E-12 1.05918798E+04 4.29325453E+01                   4
MeEc8e1oDrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.77123740E+01 3.54997648E-02-1.22541046E-05 1.91421227E-09-1.11534193E-13    2
-1.55266584E+04-1.10403911E+02-2.21887559E+00 1.05624779E-01-7.59169652E-05    3
 2.86501461E-08-4.48986982E-12-5.08273676E+03 5.03899633E+01                   4
MeEc8e1oyI 1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    71
 2.79370225E+01 3.51508725E-02-1.20987316E-05 1.88630861E-09-1.09761615E-13    2
-1.82354934E+04-1.12870694E+02-5.69572662E-01 1.00237977E-01-6.88491218E-05    3
 2.44535841E-08-3.57272632E-12-8.15259288E+03 4.08153147E+01                   4
c6e1e5oC   1/24/ 8 THERMc   6h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 1.72837064E+01 2.09547441E-02-7.22318386E-06 1.12721617E-09-6.56317543E-14    2
-1.30794819E+04-6.19017868E+01-1.59075323E+00 6.84601785E-02-5.44976291E-05    3
 2.30853603E-08-4.02852222E-12-6.79611774E+03 3.83720285E+01                   4
Ec8h15-1   1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.38137997E+01 3.29111978E-02-1.11043362E-05 1.70913415E-09-9.85919191E-14    2
 1.21766863E+03-9.32787751E+01-6.59887142E-01 8.48568447E-02-5.09516976E-05    3
 1.45505436E-08-1.49835714E-12 1.01939871E+04 3.99394663E+01                   4
Ac9e5oB    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.84634282E+01 3.47459749E-02-1.18790299E-05 1.84403615E-09-1.06988432E-13    2
-1.98492867E+04-1.15212700E+02-7.18587254E-01 1.03849300E-01-7.53910500E-05    3
 2.88638953E-08-4.58719088E-12-9.75409275E+03 4.12742454E+01                   4
EtDc7e9oBrA 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.87460428E+01 3.46680894E-02-1.18849787E-05 1.84814474E-09-1.07348982E-13    2
```

```
-1.95201843E+04-1.17894187E+02-9.37757039E-01 1.06270022E-01-7.93024518E-05    3
 3.13205667E-08-5.12729208E-12-9.37383216E+03 4.08321655E+01                   4
MeCc6e1rG  1/24/ 8 THERMc   7h  13    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    51
 2.06286628E+01 2.92376417E-02-1.00059274E-05 1.55393368E-09-9.01719819E-14    2
 5.70589927E+03-7.87995254E+01-1.54565686E+00 8.07549368E-02-5.62650639E-05    3
 2.07289386E-08-3.18615282E-12 1.34892129E+04 4.04806840E+01                   4
EtDc7e1oHrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    61
 2.88582361E+01 3.47763025E-02-1.19665371E-05 1.86542159E-09-1.08537074E-13    2
-1.96139051E+04-1.18830334E+02-2.07356317E+00 1.08859562E-01-8.07493870E-05    3
 3.13296665E-08-5.00622311E-12-9.02686043E+03 4.66910731E+01                   4
Fc9e1oE    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 2.80780146E+01 3.30659810E-02-1.08848887E-05 1.64787647E-09-9.39744912E-14    2
-1.52251186E+04-1.22764619E+02-1.27853907E+00 1.09174419E-01-8.80694149E-05    3
 3.77407444E-08-6.58758092E-12-5.79283226E+03 3.22134901E+01                   4
c7e1e6oC   1/24/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    31
 2.02433146E+01 2.55576101E-02-8.78799262E-06 1.36906664E-09-7.96161671E-14    2
-1.75679763E+04-7.60602404E+01-3.47371661E-01 7.66133908E-02-5.91438729E-05    3
 2.47222183E-08-4.31311361E-12-1.05914186E+04 3.36795687E+01                   4
c9e5oyA    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.76387535E+01 3.49211124E-02-1.19183338E-05 1.84806029E-09-1.07139996E-13    2
-1.84989265E+04-1.09771899E+02 6.09356016E-01 9.59639588E-02-6.45261240E-05    3
 2.25531854E-08-3.26273833E-12-8.85197914E+03 3.62232601E+01                   4
EtDc7e9oCrA 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1389.000    71
 2.74207699E+01 3.55716688E-02-1.22398603E-05 1.90790813E-09-1.11001535E-13    2
-1.59341085E+04-1.08584719E+02 9.45284085E-02 9.80778340E-02-6.75370200E-05    3
 2.45753090E-08-3.75225167E-12-6.20795158E+03 3.88193602E+01                   4
Ac8h15-4   1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.35136685E+01 3.37288193E-02-1.14970987E-05 1.78091793E-09-1.03163246E-13    2
 1.30454290E+03-9.16472242E+01-1.63061239E+00 9.08820010E-02-6.10884167E-05    3
 2.14089305E-08-3.10298535E-12 1.02319783E+04 4.40166630E+01                   4
EtBc5e7oyA 1/24/ 8 THERMc   7h  11o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    51
 2.15550512E+01 2.62614900E-02-9.05909909E-06 1.41448550E-09-8.23911103E-14    2
-1.04247908E+04-8.14573314E+01-5.28433349E-01 7.77608927E-02-5.54146741E-05    3
 2.06413386E-08-3.18323640E-12-2.70746241E+03 3.72416569E+01                   4
Fc9e1oC    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1381.000    71
 2.82304677E+01 3.41043206E-02-1.15796384E-05 1.79022138E-09-1.03600366E-13    2
-1.84472170E+04-1.13108518E+02 5.45344018E-01 9.50191613E-02-6.16874215E-05    3
 2.01426108E-08-2.63599843E-12-8.45419002E+03 3.69195672E+01                   4
MeEc8e1oCrI 1/24/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 3.12333014E+01 3.33031702E-02-1.16767354E-05 1.84324185E-09-1.08188353E-13    2
-1.95339069E+04-1.22548811E+02-1.12906485E-01 1.05240737E-01-7.56902029E-05    3
 2.83282066E-08-4.41769897E-12-8.39753008E+03 4.64649097E+01                   4
EtDc7e1oyI 1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.81976221E+01 3.43654852E-02-1.17102814E-05 1.81399559E-09-1.05095843E-13    2
-1.83957695E+04-1.13988719E+02 3.38536349E-01 9.83220771E-02-6.78848122E-05    3
 2.43698584E-08-3.60908764E-12-8.58306433E+03 3.60748308E+01                   4
MeDc7e1rH  1/24/ 8 THERMc   8h  15    0    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 2.38489634E+01 3.36289665E-02-1.15018377E-05 1.78560400E-09-1.03591617E-13    2
 1.45714388E+03-9.46861083E+01-1.58550772E+00 9.19236301E-02-6.27828924E-05    3
 2.24798094E-08-3.34342869E-12 1.04519347E+04 4.23931463E+01                   4
Fc9e1oD    1/24/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1378.000    71
 2.80786506E+01 3.38449165E-02-1.14167703E-05 1.75809251E-09-1.01486378E-13    2
-1.60033804E+04-1.10948150E+02 3.35281538E-02 9.47198147E-02-6.01232464E-05    3
 1.87407510E-08-2.26194974E-12-5.83348355E+03 4.12661553E+01                   4
c7e1e6oD   1/24/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 2.02765709E+01 2.51689830E-02-8.67111492E-06 1.35284796E-09-7.87611987E-14    2
-1.56746985E+04-7.62117137E+01-1.11849085E-01 7.08530913E-02-4.74723400E-05    3
 1.62768351E-08-2.28197846E-12-8.37422681E+03 3.40196090E+01                   4
ch2cco     1/25/ 8      c   3h   2o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    71
 0.57251687E+01 0.31237348E-02-0.45585432E-06 0.38137455E-10-0.14920125E-14    2
 0.18034854E+05-0.18417238E+02 0.11098851E+01 0.13675613E-01-0.78440899E-05    3
```

```
 0.11181740E-08 0.36875770E-12 0.19492883E+05 0.61536775E+01                   4
EtDc7e3oIrG 1/28/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.76012379E+01 3.54718492E-02-1.22170463E-05 1.90554124E-09-1.10911559E-13    2
-1.35918592E+04-1.08711239E+02-7.44186139E-01 1.01064341E-01-7.09400715E-05    3
 2.62268737E-08-4.04564524E-12-3.60269285E+03 4.38815724E+01                   4
Etall      1/28/8 THERGc   5h   8o   0    0G   300.000  5000.000 1390.000    51
 0.11702852E+02 0.20550847E-01-0.68724235E-05 0.10855719E-08-0.66538097E-13    2
 0.11624912E+05-0.35413887E+02 0.73222780E+00 0.45764759E-01-0.24473251E-04    3
 0.33784284E-08 0.98663807E-12 0.15071673E+05 0.22927427E+02                   4
EpchqDqB   7/13/ 7 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1384.000    71
 4.02607980E+01 3.89797029E-02-1.37785563E-05 2.18709866E-09-1.28874164E-13    2
-4.61416686E+04-1.84384590E+02-5.90662120E+00 1.44061492E-01-1.03978834E-04    3
 3.69779916E-08-5.23141347E-12-2.99087280E+04 6.44229870E+01                   4
Fc6e1e4    2/ 4/ 8 THERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1394.000    21
 1.67439542E+01 2.08334700E-02-7.05919031E-06 1.08936701E-09-6.29467680E-14    2
 1.87721893E+04-6.11929892E+01-2.33620203E+00 6.88257414E-02-5.42897299E-05    3
 2.25998592E-08-3.85248194E-12 2.50697246E+04 4.00893014E+01                   4
mche1qDqF  2/ 8/ 8 THERMc   7h  12o   4    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 3.17548129E+01 2.88763031E-02-1.01132724E-05 1.59535811E-09-9.35981827E-14    2
-4.31849717E+04-1.40804525E+02-2.82144427E+00 1.16216642E-01-9.65201526E-05    3
 4.11798587E-08-7.10979883E-12-3.18082068E+04 4.26077784E+01                   4
mche1qDojF 2/ 8/ 8 THERMc   7h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 2.77021460E+01 2.77867768E-02-9.67209488E-06 1.51950452E-09-8.88929156E-14    2
-2.32219341E+04-1.20300131E+02-3.92278807E+00 1.07986982E-01-8.92517974E-05    3
 3.80282146E-08-6.55849368E-12-1.28582646E+04 4.73260219E+01                   4
MeEc8e9oAqC 2/8/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1390.000    91
 3.44456417E+01 3.69080881E-02-1.28142087E-05 2.00943763E-09-1.17396162E-13    2
-5.24008742E+04-1.43307238E+02 1.34557580E+00 1.17333862E-01-8.99246125E-05    3
 3.66602642E-08-6.21588889E-12-4.10664787E+04 3.36123676E+01                   4
MeEc6e5oAqCrG  2/8 THERMc   7h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.82630872E+01 2.56638300E-02-8.94931881E-06 1.40751304E-09-8.24002622E-14    2
-2.59803253E+04-1.13679125E+02 2.77611636E+00 8.95184220E-02-7.24254673E-05    3
 3.09808202E-08-5.45358326E-12-1.74411905E+04 2.18732962E+01                   4
Dc4oAqC    2/ 8/ 8 THERMc   4h   7o   3    0G   300.000  5000.000 1385.000    51
 1.92347354E+01 1.59149470E-02-5.58395531E-06 8.81839486E-10-5.17738216E-14    2
-2.11118288E+04-6.67011744E+01 3.55763032E+00 5.38877857E-02-4.20344198E-05    3
 1.73645702E-08-2.98294670E-12-1.57142662E+04 1.71657716E+01                   4
MeCc6e7oAqErF 2/ 8/ 8 THERMc   7h  11o   3    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.82739987E+01 2.52931815E-02-8.83689657E-06 1.39168712E-09-8.15521206E-14    2
-1.88873645E+04-1.10996575E+02 7.89561691E+01 9.40642718E-02-7.65279418E-05    3
 3.24007637E-08-5.60013013E-12-9.73510471E+03 3.51017431E+01                   4
MeCc6e5e7oA 2/8/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.07404502E+01 2.48280427E-02-8.56379448E-06 1.33705185E-09-7.78764769E-14    2
-1.29729969E+04-7.79329132E+01-1.12142149E+00 7.83311177E-02-6.00527258E-05    3
 2.44557155E-08-4.12706828E-12-5.55181627E+03 3.87372969E+01                   4
MeCc6e5e7oyA 2/8/8 THERMc   7h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    41
 2.03296987E+01 2.26873875E-02-7.83828779E-06 1.22514690E-09-7.14147706E-14    2
 5.98703795E+03-7.40579067E+01-3.46568834E-01 7.35262059E-02-5.69864442E-05    3
 2.33766253E-08-3.96181820E-12 1.29763984E+04 3.61916678E+01                   4
MeBc5e1e4rF 2/8/ 8 THERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.71334891E+01 2.06071079E-02-7.00134534E-06 1.08222390E-09-6.26003462E-14    2
 1.84353813E+04-6.37416111E+01-2.08589620E+00 7.02893415E-02-5.75392781E-05    3
 2.48984149E-08-4.39146617E-12 2.46625677E+04 3.78336077E+01                   4
MeEc8e9oAojC 2/8/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 3.04339220E+01 3.53997343E-02-1.21454360E-05 1.88954803E-09-1.09787103E-13    2
-3.23621855E+04-1.23498317E+02 3.49703702E-01 1.08774790E-01-8.23796570E-05    3
 3.32142720E-08-5.55758388E-12-2.21352542E+04 3.71234709E+01                   4
MeCc6e7oA  2/ 8/ 8 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    51
 2.19825556E+01 2.83616887E-02-9.76489749E-06 1.52271848E-09-8.86150067E-14    2
-2.91154492E+04-8.46727882E+01-6.55203325E-01 8.08743044E-02-5.69368920E-05    3
 2.11394671E-08-3.27585807E-12-2.11498423E+04 3.71494444E+01                   4
```

```
Ic9e3qFqH  2/ 8/ 8 THERMc   9h  17o   4    0G   300.000  5000.000 1391.000    41
 3.99214291E+01 3.68244931E-02-1.28602770E-05 2.02474891E-09-1.18626355E-13    2
-3.24333397E+04-1.68345825E+02 3.42843490E-02 1.36493128E-01-1.10762783E-04    3
 4.67632960E-08-8.06047111E-12-1.91426513E+04 4.37206262E+01                   4
c9e1e6qD   2/ 8/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    81
 3.20717501E+01 3.66544334E-02-1.26939295E-05 1.98722168E-09-1.15962536E-13    2
-2.65588469E+04-1.33509904E+02-2.17161393E+00 1.21602639E-01-9.57508306E-05    3
 3.98785213E-08-6.84665319E-12-1.50489142E+04 4.88313637E+01                   4
c9e1e6ojD  2/ 8/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    61
 2.81669785E+01 3.48173355E-02-1.18617240E-05 1.83681271E-09-1.06380018E-13    2
-6.51989284E+03-1.14196123E+02-2.80225968E+00 1.11322580E-01-8.54699685E-05    3
 3.45374583E-08-5.72722626E-12 3.82926634E+03 5.06688957E+01                   4
c6e3oA     2/ 8/ 8 THERMc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 1.83335573E+01 2.42384336E-02-8.34179624E-06 1.30049092E-09-7.56713528E-14    2
-2.46440352E+04-6.60228761E+01-7.43098070E-01 6.75191419E-02-4.59641521E-05    3
 1.62972308E-08-2.39792598E-12-1.78448055E+04 3.69629712E+01                   4
c6e3oyA    2/ 8/ 8 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 1.79164768E+01 2.21089552E-02-7.62133514E-06 1.18949022E-09-6.92667918E-14    2
-5.68199822E+03-6.21132884E+01 3.35169089E-02 6.27096053E-02-4.28992287E-05    3
 1.52253216E-08-2.23544811E-12 6.83088437E+02 3.44086825E+01                   4
BchxqAqC   4/24/ 6 thermc   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.98556800e+01 2.53932414e-02-9.01194962e-06 1.43437601e-09-8.46824672e-14    2
-3.09326307e+04-1.30765809e+02-2.43293753e+00 9.54793112e-02-6.38371965e-05    3
 1.93409599e-08-2.03740537e-12-1.93630522e+04 4.42454223e+01                   4
c9e6oAqE   2/11/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.41964681E+01 3.71946476E-02-1.29301638E-05 2.02936087E-09-1.18631325E-13    2
-5.16114475E+04-1.41857565E+02 7.60301871E-01 1.17934161E-01-8.97968761E-05    3
 3.63384982E-08-6.12394622E-12-4.01089301E+04 3.70418259E+01                   4
c9e6oAojE  2/11/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 3.03982059E+01 3.52741295E-02-1.20711464E-05 1.87500420E-09-1.08829605E-13    2
-3.16313857E+04-1.23196554E+02-5.72070962E-01 1.10784593E-01-8.41208075E-05    3
 3.38317042E-08-5.62894773E-12-2.11252934E+04 4.21250221E+01                   4
MeEc8e1oIqD 2/11/8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.50525277E+01 3.64205393E-02-1.26544528E-05 1.98555985E-09-1.16054472E-13    2
-5.20774783E+04-1.47844706E+02-1.03435067E+00 1.23778611E-01-9.49916447E-05    3
 3.79135733E-08-6.21006099E-12-3.98058968E+04 4.49565518E+01                   4
MeEc8e1oIojD 2/1/8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1396.000    71
 3.05429627E+01 3.54905040E-02-1.22171910E-05 1.90495267E-09-1.10853982E-13    2
-3.18293001E+04-1.25153892E+02-1.44054990E+00 1.12984184E-01-8.52233714E-05    3
 3.36863247E-08-5.47824979E-12-2.09692623E+04 4.56823456E+01                   4
pche5qH    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.17222692E+01 3.87734455E-02-1.34543894E-05 2.10917309E-09-1.23200436E-13    2
-3.74326664E+04-1.42120984E+02-8.27706804E+00 1.39580834E-01-1.13271717E-04    3
 4.79995609E-08-8.29788266E-12-2.42052763E+04 7.02105270E+01                   4
pche5ojH   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.78749104E+01 3.70042021E-02-1.27623688E-05 1.99257651E-09-1.16062271E-13    2
-1.74951660E+04-1.23268616E+02-7.51333064E+00 1.22847685E-01-9.33937153E-05    3
 3.68374971E-08-5.93823644E-12-5.52988360E+03 6.56498297E+01                   4
EtDc7e1oIrC 2/12/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    61
 2.75668109E+01 3.55217676E-02-1.21497451E-05 1.88661300E-09-1.09480406E-13    2
-2.14104864E+04-1.12685833E+02-2.61655541E-01 9.83674578E-02-6.62602007E-05    3
 2.31351250E-08-3.33570655E-12-1.14830984E+04 3.76174003E+01                   4
pche4qH    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.16928192E+01 3.87840240E-02-1.34545363E-05 2.10880639E-09-1.23162528E-13    2
-3.80430168E+04-1.41199994E+02-7.28054551E+00 1.36269038E-01-1.09253323E-04    3
 4.58623629E-08-7.87796099E-12-2.50711164E+04 6.59635284E+01                   4
pche4ojH   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1396.000    31
 2.79361118E+01 3.69223384E-02-1.27274048E-05 1.98640912E-09-1.15674142E-13    2
-1.81400180E+04-1.22870669E+02-6.99939283E+00 1.21762971E-01-9.26330006E-05    3
 3.66640093E-08-5.94079378E-12-6.32572772E+03 6.36166789E+01                   4
MeEc8e9oArD 2/12/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    61
```

```
 2.75849556E+01 3.53957567E-02-1.20840567E-05 1.87421714E-09-1.08677200E-13    2
-2.21075201E+04-1.12164540E+02 1.27188746E+00 9.29581329E-02-5.94537112E-05    3
 1.94021852E-08-2.58499730E-12-1.25230140E+04 3.06343331E+01                   4
c9e6oAqD   2/12/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.39312274E+01 3.73574775E-02-1.29722436E-05 2.03444078E-09-1.18866229E-13    2
-5.20246429E+04-1.40078657E+02 1.17186763E+00 1.15525209E-01-8.62272980E-05    3
 3.41637904E-08-5.64903299E-12-4.06704009E+04 3.55163078E+01                   4
c9e6oAojD  2/12/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 3.00463394E+01 3.55992989E-02-1.21876557E-05 1.89352726E-09-1.09918187E-13    2
-3.20175670E+04-1.20944051E+02-4.69762718E-03 1.07764218E-01-7.97751951E-05    3
 3.12787248E-08-5.09016175E-12-2.17121812E+04 3.98627947E+01                   4
BchxqAqD   4/24/ 6 thermc   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.98556800e+01 2.53932414e-02-9.01194962e-06 1.43437601e-09-8.46824672e-14    2
-3.09326307e+04-1.30765809e+02-2.43293753e+00 9.54793112e-02-6.38371965e-05    3
 1.93409599e-08-2.03740537e-12-1.93630522e+04 4.42454223e+01                   4
chxe1qD    4/25/ 6 thermc   6h  10o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 2.22604918e+01 2.43459576e-02-8.48682527e-06 1.33468541e-09-7.81399843e-14    2
-2.41127925e+04-9.45683359e+01-4.51101263e+00 8.81772584e-02-6.68071503e-05    3
 2.56310780e-08-3.96967992e-12-1.49920203e+04 4.86749738e+01                   4
chxe1ojD   4/25/ 6 thermc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1391.000    11
 1.86955890e+01 2.32054938e-02-8.10991067e-06 1.27749802e-09-7.48744708e-14    2
-4.42427716e+03-7.82570813e+01-6.05241022e+00 8.25140684e-02-6.31121283e-05    3
 2.47789614e-08-3.96933048e-12 4.02750196e+03 5.41374764e+01                   4
ac3h4hco1  4/24/ 6 thermc   4h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1385.000    21
 1.31411233e+01 1.20974544e-02-4.25024176e-06 6.71876889e-10-3.94756754e-14    2
 1.44875725e+04-4.25915316e+01 5.84137389e-01 4.10586368e-02-2.99210110e-05    3
 1.11323029e-08-1.69792013e-12 1.89033496e+04 2.50108321e+01                   4
pche6qI    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.17222692E+01 3.87734455E-02-1.34543894E-05 2.10917309E-09-1.23200436E-13    2
-3.74326664E+04-1.42120984E+02-8.27706804E+00 1.39580834E-01-1.13271717E-04    3
 4.79995609E-08-8.29788266E-12-2.42052763E+04 7.02105270E+01                   4
pche6ojI   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.78749104E+01 3.70042021E-02-1.27623688E-05 1.99257651E-09-1.16062271E-13    2
-1.74951660E+04-1.23268616E+02-7.51333064E+00 1.22847685E-01-9.33937153E-05    3
 3.68374971E-08-5.93823644E-12-5.52988360E+03 6.56498297E+01                   4
MeEc8e1oIrC 2/14/8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    61
 2.79406556E+01 3.56198001E-02-1.22715567E-05 1.91448590E-09-1.11452380E-13    2
-2.01001727E+04-1.15788302E+02-1.64368748E+00 1.03307839E-01-7.13832451E-05    3
 2.54382977E-08-3.72018619E-12-9.65940122E+03 4.36430061E+01                   4
pche5qI    1/15/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1394.000    41
 3.17222692E+01 3.87734455E-02-1.34543894E-05 2.10917309E-09-1.23200436E-13    2
-3.74326664E+04-1.42120984E+02-8.27706804E+00 1.39580834E-01-1.13271717E-04    3
 4.79995609E-08-8.29788266E-12-2.42052763E+04 7.02105270E+01                   4
pche5ojI   1/15/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.78749104E+01 3.70042021E-02-1.27623688E-05 1.99257651E-09-1.16062271E-13    2
-1.74951660E+04-1.23268616E+02-7.51333064E+00 1.22847685E-01-9.33937153E-05    3
 3.68374971E-08-5.93823644E-12-5.52988360E+03 6.56498297E+01                   4
Fc9e4oA    2/14/ 8 THERMc   9h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.76704536E+01 3.53404605E-02-1.20688667E-05 1.87225641E-09-1.08579858E-13    2
-2.03728817E+04-1.12843505E+02-4.72703234E-01 9.90528915E-02-6.70533915E-05    3
 2.35068844E-08-3.39839047E-12-1.03572713E+04 3.90904759E+01                   4
c7e4e6oA   2/14/ 8 THERMc   7h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.06695205E+01 2.50617448E-02-8.58698052E-06 1.33454174E-09-7.74776234E-14    2
-1.51598335E+04-7.86111329E+01-2.31380590E-01 7.90259549E-02-6.42176858E-05    3
 2.81936349E-08-5.10341683E-12-8.28925591E+03 3.20277574E+01                   4
c7e4e6oyA  2/14/ 8 THERMc   7h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.02470527E+01 2.29414229E-02-7.87065689E-06 1.22428606E-09-7.11203688E-14    2
 3.80360006E+03-7.46724821E+01 5.54023500E-01 7.41765690E-02-6.10995554E-05    3
 2.70944693E-08-4.93607343E-12 1.02373702E+04 2.94331392E+01                   4
Ec6h9-13   2/14/ 8 THERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    11
 1.66858073E+01 2.11646577E-02-7.14022640E-06 1.09843296E-09-6.33257860E-14    2
 1.54794179E+04-6.32637113E+01-3.02895071E+00 7.28507900E-02-6.03341464E-05    3
 2.63647724E-08-4.67473029E-12 2.17768320E+04 4.06424531E+01                   4
Fc6h9-13   2/14/ 8 THERMc   6h   9    0    0G   300.000  5000.000 1398.000    21
 1.66526633E+01 2.07313239E-02-6.98155215E-06 1.07262447E-09-6.17783332E-14    2
 2.34571371E+04-5.94027644E+01-1.95074776E+00 6.99993459E-02-5.83590460E-05    3
 2.58219203E-08-4.63869054E-12 2.93664141E+04 3.84973850E+01                   4
AchxqBqD   4/24/ 6 thermc   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.98556800e+01 2.53932414e-02-9.01194962e-06 1.43437601e-09-8.46824672e-14    2
-3.09326307e+04-1.30765809e+02-2.43293753e+00 9.54793112e-02-6.38371965e-05    3
 1.93409599e-08-2.03740537e-12-1.93630522e+04 4.42454223e+01                   4
c9e6oAqC   2/12/ 8 THERMc   9h  16o   3    0G   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.39312274E+01 3.73574775E-02-1.29722436E-05 2.03444078E-09-1.18866229E-13    2
-5.20246429E+04-1.40078657E+02 1.17186763E+00 1.15525209E-01-8.62272980E-05    3
 3.41637904E-08-5.64903299E-12-4.06704009E+04 3.55163078E+01                   4
c9e6oAojC  2/12/ 8 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    71
 3.00463394E+01 3.55992989E-02-1.21876557E-05 1.89352726E-09-1.09918187E-13    2
-3.20175670E+04-1.20944051E+02-4.69762718E-03 1.07764218E-01-7.97751951E-05    3
 3.12787248E-08-5.09016175E-12-2.17121812E+04 3.98627947E+01                   4
c7e4oA     7/ 9/ 7 THERMc   7h  12o   1    0G   300.000  5000.000 1384.000    51
 2.18585143E+01 2.78362301E-02-9.45398739E-06 1.46144707E-09-8.45552745E-14    2
-2.93180218E+04-8.32802904E+01 2.82340042E-01 7.63232047E-02-5.08887532E-05    3
 1.75724129E-08-2.50312989E-12-2.16009655E+04 3.33334273E+01                   4
c6e2e5oA   2/14/ 8 THERMc   6h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1394.000    31
 1.83995952E+01 1.96332751E-02-6.77971304E-06 1.05936874E-09-6.17396006E-14    2
-1.24536624E+04-6.83802609E+01-1.49627654E+00 7.09429021E-02-5.90380815E-05    3
 2.57966095E-08-4.58731337E-12-5.97359579E+03 3.68497260E+01                   4
c6e2e5oyA  2/14/ 8 THERMc   6h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1395.000    31
 1.78431104E+01 1.75188059E-02-6.04039102E-06 9.42827312E-10-5.49044046E-14    2
 3.68070565E+03-6.46282281E+01-2.88622657E-01 6.62227270E-02-5.79619899E-05    3
 2.66055708E-08-4.92314842E-12 9.41627396E+03 3.06224622E+01                   4
Dc6e5oAoC  2/14/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 2.02349508E+01 1.83345274E-02-6.39116571E-06 1.00506355E-09-5.88390878E-14    2
-1.49055865E+04-7.32371055E+01-8.32090796E-01 7.14015849E-02-5.86661793E-05    3
 2.48257388E-08-4.25681473E-12-7.96504791E+03 3.85567398E+01                   4
Fc6e3oAoE  2/14/ 8 THERMc   6h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 2.03602595E+01 1.83062673E-02-6.39872038E-06 1.00804454E-09-5.90855319E-14    2
-1.88022042E+04-7.45885509E+01 1.36426217E-01 6.83827541E-02-5.49313391E-05    3
 2.28341312E-08-3.87096366E-12-1.20341312E+04 3.30697382E+01                   4
c9oAoF     2/20/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    81
 3.07257186E+01 3.64979157E-02-1.23797807E-05 1.91316548E-09-1.10701061E-13    2
-6.57300880E+04-1.24878295E+02 3.04753704E+00 9.67210766E-02-6.19433968E-05    3
 2.04510386E-08-2.80075101E-12-5.55750901E+04 2.55164190E+01                   4
MeEc8oAoI  2/20/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    81
 3.05031454E+01 3.75002503E-02-1.28808960E-05 2.00571460E-09-1.16613716E-13    2
-6.27530797E+04-1.24944508E+02 1.04511237E+00 1.03172160E-01-6.83653557E-05    3
 2.32476645E-08-3.24281885E-12-5.21585216E+04 3.44634369E+01                   4
MeEc8oyAoI 7/10/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    81
 3.00858629E+01 3.53699988E-02-1.21599296E-05 1.89460796E-09-1.10201824E-13    2
-4.37905513E+04-1.21032952E+02 1.81649331E+00 9.83870943E-02-6.53376429E-05    3
 2.21981687E-08-3.08506779E-12-3.36298681E+04 3.19331387E+01                   4
MeEc8oAoyI 7/10/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    81
 3.00858629E+01 3.53699988E-02-1.21599296E-05 1.89460796E-09-1.10201824E-13    2
-4.37905513E+04-1.21032952E+02 1.81649331E+00 9.83870943E-02-6.53376429E-05    3
 2.21981687E-08-3.08506779E-12-3.36298681E+04 3.19331387E+01                   4
EtDc7oAoI  2/20/ 8 THERMc   9h  16o   2    0G   300.000  5000.000 1377.000    81
 3.14509179E+01 3.56793245E-02-1.20561535E-05 1.85862833E-09-1.07371282E-13    2
-6.32003015E+04-1.29952686E+02 2.29511928E+00 9.94534013E-02-6.40862892E-05    3
 2.07133085E-08-2.67590544E-12-5.26355260E+04 2.81856074E+01                   4
EtDc7oAoyI 7/10/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    81
 3.06341149E+01 3.41524362E-02-1.15905222E-05 1.79145557E-09-1.03657334E-13    2
-4.40720325E+04-1.23777200E+02 3.09209923E+00 9.47400985E-02-6.15548325E-05    3
```

```
 2.02194657E-08-2.68088540E-12-3.41143314E+04 2.55055299E+01                   4
EtDc7oyAoI  7/10/7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1380.000    81
 3.06341149E+01 3.41524362E-02-1.15905222E-05 1.79145557E-09-1.03657334E-13    2
-4.40720325E+04-1.23777200E+02 3.09209923E+00 9.47400985E-02-6.15548325E-05    3
 2.02194657E-08-2.68088540E-12-3.41143314E+04 2.55055299E+01                   4
c9e8oD                 c   9h  16o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.55608106E+00 0.79293527E-01-0.31932374E-04 0.57395542E-08-0.38447069E-12    2
-0.28140414E+05 0.41014076E+02-0.39456356E+00 0.10183985E+00-0.65018299E-04    3
 0.14762166E-07 0.19830264E-11-0.30163439E+05 0.37978130E+02                   4
Hc8oD      2/20/ 8 THERMc   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1383.000    71
 2.54583317E+01 3.43402731E-02-1.17414395E-05 1.82273018E-09-1.05752320E-13    2
-2.66900665E+04-9.87909552E+01 1.59052176E+00 8.71428219E-02-5.67022155E-05    3
 1.95736520E-08-2.87151800E-12-1.79703663E+04 3.06710448E+01                   4
MeDc7oHrA  7/10/ 7 THERMc   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.59445373E+01 3.42704623E-02-1.17891508E-05 1.83733795E-09-1.06882908E-13    2
-2.40066400E+04-1.02867324E+02-1.21420268E-01 9.19733791E-02-6.00024986E-05    3
 1.99922071E-08-2.71775810E-12-1.45915394E+04 3.83272533E+01                   4
Ec8oA      7/ 6/ 7 THERMc   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1371.000    71
 2.62742875E+01 3.26514565E-02-1.09654742E-05 1.68349940E-09-9.69743404E-14    2
-2.44651589E+04-1.03193889E+02 2.23082786E+00 8.06361592E-02-4.36093752E-05    3
 9.73004079E-09-4.14221182E-13-1.53574767E+04 2.87397750E+01                   4
EtCc6oArH  7/10/ 7 THERMc   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.60283360E+01 3.38008935E-02-1.15432817E-05 1.79055184E-09-1.03828677E-13    2
-2.41091809E+04-1.03015456E+02 9.46388914E-01 8.94517478E-02-5.83527990E-05    3
 1.96538809E-08-2.72995524E-12-1.50482662E+04 3.28291994E+01                   4
MeDc7oArH  7/10/ 7 THERMc   8h  15o   1    0G   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.60283360E+01 3.38008935E-02-1.15432817E-05 1.79055184E-09-1.03828677E-13    2
-2.41091809E+04-1.03015456E+02 9.46388914E-01 8.94517478E-02-5.83527990E-05    3
 1.96538809E-08-2.72995524E-12-1.50482662E+04 3.28291994E+01                   4
vinacrol   3/ 8/ 7 THERMc   5h   6o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    21
 1.96694186E+01 9.47268019E-03-3.43345392E-06 5.54119499E-10-3.30290903E-14    2
-1.21198582E+04-7.96616315E+01-1.49467174E+00 6.32157577E-02-5.57679330E-05    3
 2.37098997E-08-3.94697393E-12-5.31850599E+03 3.22824837E+01                   4
Mec8oor    7/9/ 7 THERMc   9h  15o   2    0G   300.000  5000.000 1386.000    81
 2.97125065E+01 3.57065597E-02-1.22803613E-05 1.91385849E-09-1.11340978E-13    2
-4.14867894E+04-1.17451902E+02 1.66225757E+00 9.95807618E-02-6.85302768E-05    3
 2.48591631E-08-3.78775770E-12-3.14699606E+04 3.39686628E+01                   4
Mec8ooqj   9/4/ 8 THERGc   9h  15o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    81
-0.23168776E+01 0.91679782E-01-0.36904705E-04 0.66328960E-08-0.44437812E-12    2
-0.43966555E+05 0.68893707E+02-0.14003134E+01 0.12522805E+00-0.94845032E-04    3
 0.29489923E-07 0.64414891E-13-0.48159820E+05 0.50238003E+02                   4
Mec8ooqr   9/4/ 8 THERGc   9h  15o   4    0G   300.000  5000.000 1000.000    81
-0.19560032E+01 0.91180608E-01-0.36667461E-04 0.65853754E-08-0.44094670E-12    2
-0.41358137E+05 0.68516571E+02-0.13489743E+00 0.12440786E+00-0.98816447E-04    3
 0.35233459E-07-0.20774292E-11-0.45911262E+05 0.44643814E+02                   4
Mec8ooqqj  9/4/ 8 THERGc   9h  15o   6    0G   300.000  5000.000 1000.000    81
 0.86050135E+00 0.94729088E-01-0.38137510E-04 0.68522601E-08-0.45881723E-12    2
-0.56428559E+05 0.60026901E+02-0.12999454E+01 0.14243157E+00-0.11416527E-03    3
 0.37487915E-07-0.72585113E-12-0.60382277E+05 0.55117004E+02                   4
Mec8oooq   9/4/ 8 THERGc   9h  14o   5    0G   300.000  5000.000 1000.000    81
 3.80978925E+01 3.38878447E-02-1.18895339E-05 1.87770993E-09-1.10248978E-13    2
-9.30538929E+04-1.55143022E+02 1.31084640E+00 1.23409101E-01-9.71869180E-05    3
 3.97022795E-08-6.65296289E-12-8.05531482E+04 4.12992063E+01                   4
c5oAoE                 c   5h   8o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.24373136E+01 0.51202632E-01-0.21667551E-04 0.40336059E-08-0.27706578E-12    2
-0.37370984E+05 0.51938530E+02 0.23621762E+01 0.54721203E-01-0.36765450E-04    3
 0.97104857E-08 0.74680491E-12-0.40521121E+05 0.20666948E+02                   4
c5oyAoE                c   5h   7o   2    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.51536059E+00 0.41369535E-01-0.15779357E-04 0.27307743E-08-0.17814541E-12    2
-0.20339604E+05 0.38679955E+02 0.27169209E+01 0.53290054E-01-0.44060904E-04    3
 0.19720455E-07-0.30373148E-11-0.22749828E+05 0.20743933E+02                   4
```

```
bmepral                c   4h   8o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10151960e+02 0.23504560e-01-0.91125790e-05 0.16598370e-08-0.11414680e-12    2
-0.30982760e+05-0.24897940e+02 0.52899470e+01 0.11734300e-01 0.57115020e-04    3
-0.79192970e-07 0.31143350e-10-0.28349770e+05 0.64807050e+01                   4
bme1bu                 c   5h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10937200e+02 0.27185350e-01-0.99662410e-05 0.17682290e-08-0.11985660e-12    2
-0.98058280e+04-0.31743770e+02 0.12745540e+01 0.43041050e-01-0.18687710e-05    3
-0.25785700e-07 0.13143540e-10-0.65343850e+04 0.20967770e+02                   4
bme2bu                 c   5h  100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.97319670e+01 0.28282620e-01-0.10345010e-04 0.18318230e-08-0.12399620e-12    2
-0.10264160e+05-0.25249020e+02 0.20328180e+01 0.34178470e-01 0.16926160e-04    3
-0.42233620e-07 0.18473590e-10-0.73064760e+04 0.18442470e+02                   4
bddm1pe                c   7h  14o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.17509590e+02 0.34486190e-01-0.11316090e-04 0.17623450e-08-0.10689940e-12    2
-0.18526110e+05-0.65233790e+02-0.16766370e+01 0.80957880e-01-0.47117420e-04    3
 0.92824520e-08 0.87142420e-12-0.12717640e+05 0.35977700e+02                   4
bddm2pe                c   7h  140   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14836560e+02 0.38891260e-01-0.14248940e-04 0.25286670e-08-0.17147340e-12    2
-0.18940380e+05-0.50818010e+02-0.98176050e+00 0.71037990e-01-0.20175950e-04    3
-0.22161750e-07 0.14117540e-10-0.13904940e+05 0.33925750e+02                   4
dddm1pe                c   7h  14o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.19716140e+02 0.30113840e-01-0.92675500e-05 0.13780170e-08-0.80915640e-13    2
-0.20157720e+05-0.80672900e+02-0.21737130e+01 0.79781460e-01-0.44949610e-04    3
 0.85210090e-08 0.66753800e-12-0.13143090e+05 0.36142160e+02                   4
dddm2pe                c   7h  140   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16257090e+02 0.38236060e-01-0.14522610e-04 0.26230830e-08-0.17964670e-12    2
-0.17383950e+05-0.61581170e+02-0.22077980e+01 0.75057240e-01-0.18234300e-04    3
-0.30516100e-07 0.18314940e-10-0.11506530e+05 0.37427180e+02                   4
bddmpe2                c   7h  150   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16309240e+02 0.39905120e-01-0.14618690e-04 0.25943000e-08-0.17590180e-12    2
-0.10766490e+05-0.55890620e+02-0.13236110e+00 0.73926810e-01-0.22675040e-04    3
-0.21039570e-07 0.13934230e-10-0.55638350e+04 0.32040860e+02                   4
bbdtmpe1               c   8h  170   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.20911010e+02 0.43678940e-01-0.16540700e-04 0.29850600e-08-0.20441870e-12    2
-0.13048670e+05-0.83243700e+02-0.34957080e+01 0.10263880e+00-0.53734120e-04    3
-0.60968670e-08 0.11517760e-10-0.57980340e+04 0.45085500e+02                   4
bddm3pe2               c   7h  130   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15030950e+02 0.36774070e-01-0.13626750e-04 0.24287890e-08-0.16502960e-12    2
-0.60348940e+04-0.52631880e+02 0.40751940e+01 0.46120910e-01 0.22532960e-04    3
-0.57741870e-07 0.25454840e-10-0.18870980e+04 0.92730470e+01                   4
bmepryl                c   4h   7o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40527920e+01 0.27875960e-01-0.96009000e-05 0.15472700e-08-0.96096580e-13    2
-0.10140100e+05 0.98522260e+01-0.15898810e+01 0.51536370e-01-0.40853490e-04    3
 0.17683930e-07-0.30057420e-11-0.93623300e+04 0.36144840e+02                   4
bme2b1                 c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11081470e+02 0.24562060e-01-0.89195490e-05 0.15769500e-08-0.10672820e-12    2
 0.67510090e+04-0.33052090e+02 0.46992280e+00 0.48974820e-01-0.21876810e-04    3
-0.52841100e-08 0.59103880e-11 0.99871140e+04 0.23098530e+02                   4
cme2b1                 c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10958480e+02 0.24627890e-01-0.89067730e-05 0.15715180e-08-0.10622250e-12    2
 0.68037210e+04-0.32528290e+02 0.62891630e+00 0.48140260e-01-0.20775400e-04    3
-0.58691480e-08 0.60202500e-11 0.99681790e+04 0.22196320e+02                   4
nec5h11                c   5h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13641870e+02 0.27242350e-01-0.10431190e-04 0.18926440e-08-0.12999740e-12    2
-0.16578470e+04-0.49349100e+02-0.21047980e+01 0.64296010e-01-0.31086860e-04    3
-0.77762360e-08 0.88875570e-11 0.30609290e+04 0.33667770e+02                   4
dddmpe2                c   7h  150   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17675750e+02 0.38879810e-01-0.14618620e-04 0.26282110e-08-0.17957150e-12    2
-0.10976990e+05-0.66005280e+02-0.18460080e+01 0.82685160e-01-0.34095980e-04    3
-0.15461190e-07 0.13103600e-10-0.49997280e+04 0.37488590e+02                   4
bbdtmpe3               c   8h  170   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.20121340e+02 0.44393860e-01-0.16650870e-04 0.29903070e-08-0.20419360e-12    2
-0.15279840e+05-0.78712150e+02-0.28574670e+01 0.98399490e-01-0.47300220e-04    3
-0.99414050e-08 0.12350040e-10-0.83653100e+04 0.42510860e+02                   4
dddm2pe1                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.21298230e+02 0.25341790e-01-0.70485730e-05 0.97790260e-09-0.54937080e-13    2
-0.50120330e+04-0.89060900e+02-0.33426200e+01 0.86027340e-01-0.60368850e-04    3
 0.21235340e-07-0.30397390e-11 0.25920670e+04 0.41120380e+02                   4
bddtmpe2                c   8h  17o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20346140e+02 0.44311420e-01-0.16669400e-04 0.29974010e-08-0.20481060e-12    2
-0.16539970e+05-0.79685470e+02-0.15091900e+01 0.92175710e-01-0.34775580e-04    3
-0.21238850e-07 0.16128660e-10-0.97890160e+04 0.36469990e+02                   4
bddtmpe1                c   8h  17o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20911050e+02 0.43678900e-01-0.16540740e-04 0.29850780e-08-0.20439780e-12    2
-0.13551910e+05-0.83646540e+02-0.34973340e+01 0.10265100e+00-0.53765970e-04    3
-0.60620390e-08 0.11504220e-10-0.63010960e+04 0.44689680e+02                   4
bddm1pe3                c   7h  13o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16530140e+02 0.35083040e-01-0.12873890e-04 0.22897510e-08-0.15552850e-12    2
-0.32202370e+04-0.59488400e+02-0.29851360e+01 0.88874500e-01-0.64136170e-04    3
 0.18769960e-07 0.35035780e-12 0.22655250e+04 0.41538190e+02                   4
bddm2pe3                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.18201300e+02 0.30716410e-01-0.93284530e-05 0.13728590e-08-0.79983510e-13    2
 0.88809840e+04-0.66954060e+02-0.13693530e+01 0.84053900e-01-0.66125900e-04    3
 0.31460980e-07-0.71377340e-11 0.14604890e+05 0.35031520e+02                   4
dddm2pe2                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.20219290e+02 0.25323120e-01-0.68809740e-05 0.93718270e-09-0.51914210e-13    2
 0.82498500e+04-0.81165020e+02-0.13731680e+01 0.75941230e-01-0.48263900e-04    3
 0.15191090e-07-0.19360650e-11 0.15140920e+05 0.33783480e+02                   4
dm2my1pe                c   7h  13o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16610540e+02 0.34975170e-01-0.12786340e-04 0.22708020e-08-0.15415640e-12    2
-0.41986050e+03-0.60169250e+02-0.36190570e+01 0.93028600e-01-0.73145190e-04    3
 0.27139350e-07-0.24877000e-11 0.51522180e+04 0.43991740e+02                   4
dddm1pe3                c   7h  13o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17785390e+02 0.34560070e-01-0.13182020e-04 0.23877390e-08-0.16385020e-12    2
-0.29401520e+04-0.69454340e+02-0.30424400e+01 0.86752710e-01-0.50612260e-04    3
 0.58563310e-09 0.77036780e-11 0.31451350e+04 0.39575530e+02                   4
bddm2pe1                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.18769140e+02 0.31545920e-01-0.98765720e-05 0.14851380e-08-0.87797920e-13    2
-0.48411460e+04-0.71880680e+02-0.16607960e+01 0.82436520e-01-0.54045480e-04    3
 0.17091320e-07-0.19931760e-11 0.13459910e+04 0.35712450e+02                   4
dddm1pe2                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.20740200e+02 0.26245680e-01-0.74053560e-05 0.10352940e-08-0.58313900e-13    2
 0.92118540e+04-0.83729350e+02-0.26282780e+01 0.85259010e-01-0.59217170e-04    3
 0.19251370e-07-0.20958000e-11 0.16197750e+05 0.39024320e+02                   4
oc7h14                  c   7h  14o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25000000e+01 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00    2
-0.74540000e+03 0.43660000e+01 0.25000000e+01 0.00000000e+00 0.00000000e+00    3
 0.00000000e+00 0.00000000e+00-0.74540000e+03 0.43660000e+01                   4
bme2pe4                 c   6h  11o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13336770e+02 0.30356710e-01-0.11190900e-04 0.19917310e-08-0.13529090e-12    2
 0.42955280e+03-0.43127740e+02 0.13644400e+01 0.52697560e-01-0.93923390e-05    3
-0.23485240e-07 0.13174620e-10 0.43392120e+04 0.21498940e+02                   4
bddm1pe                 c   7h  14o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.17509590e+02 0.34486190e-01-0.11316090e-04 0.17623450e-08-0.10689940e-12    2
-0.18526110e+05-0.65233790e+02-0.16766370e+01 0.80957880e-01-0.47117420e-04    3
 0.92824520e-08 0.87142420e-12-0.12717640e+05 0.35977700e+02                   4
c4h8o                   c   4h   8o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11236290e+02 0.22227950E-01-0.85810350E-05 0.15630450E-08-0.10758900E-12    2
-0.21367730e+05-0.35455990e+02-0.15911200e+01 0.50798940e-01-0.20149310e-04    3
-0.12146500E-07 0.94266570E-11-0.17449170E+05 0.32552090E+02                   4
c3h5co                  c   4h   5o   10   0G   300.000  5000.000 1397.000     1
 9.36897209E+00 1.22997793E-02-4.12628159E-06 6.32381255E-10-3.63615838E-14    2

-6.17202097E+03-2.23749809E+01 1.21848187E+00 2.93457259E-02-1.67440015E-05    3
 4.37355537E-09-3.61335278E-13-3.16882010E+03 2.20602429E+01                   4
metacrol                c   4h   6o   10   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.38156020E+01 0.37071840E-01-0.17932810E-04 0.36718360E-08-0.27030160E-12    2
-0.16725130E+05 0.65665210E+01 0.25438820E+00 0.42555410E-01-0.19265040E-04    3
 0.20434690E-08 0.61431930E-12-0.15231460E+05 0.26670690E+02                   4
c4h7o                   c   4h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000     1
-0.13085730E+02 0.58325150E-01-0.25254530E-04 0.47775550E-08-0.33194150E-12    2
 0.11295830E+05 0.10417030E+03-0.36958640E+01 0.64157820E-01-0.57505160E-04    3
 0.23262420E-07-0.18917710E-11 0.54305790E+04 0.43828400E+02                   4
ic8h18                  c   8h  18o   00   0G   298.150  5000.000  1000.00    1
 0.19396317E+02 0.48813742E-01-0.15579804E-04 0.21783064E-08-0.10839138E-12    2
-0.37133922E+05-0.78853134E+02 0.42935711E+00 0.76576948E-01 0.84130588E-05    3
-0.58660319E-07 0.27941371E-10-0.30446438E+05 0.25673538E+02                   4
i2c8h16                 c   8h  16o   00   0G   300.000  5000.000  1000.00    1
 0.21545710E+02 0.36051430E-01-0.11269630E-04 0.16953140E-08-0.10038990E-12    2
-0.23287760E+05-0.89197200E+02-0.43880060E+01 0.97693000E-01-0.57964900E-04    3
 0.11578220E-07 0.98797420E-12-0.15298140E+05 0.48086220E+02                   4
i1c8h16                 c   8h  16o   00   0G   300.000  5000.000  1000.00    1
 0.22560830E+02 0.36539260E-01-0.11728560E-04 0.17981240E-08-0.10788760E-12    2
-0.24413260E+05-0.94340900E+02-0.42815920E+01 0.10405490E+00-0.66413430E-04    3
 0.14796950E-07 0.88810260E-12-0.16549240E+05 0.46324900E+02                   4
ic8h15                  c   8h  15o   00   0G   200.000  5000.000  1000.00    1
 0.19260140E+02 0.41975087E-01-0.16131085E-04 0.28206287E-08-0.18473902E-12    2
-0.79551900E+04-0.76828269E+02-0.47166007E+01 0.11481699E+00-0.11127083E-03    3
 0.70481372E-07-0.21570900E-10-0.13241062E+04 0.46318118E+02                   4
pc7h15      2/ 4/95     c   7h  15   0    0G   300.000  5000.000 1390.000     61
 2.33667406e+01 3.07319555e-02-1.03508107e-05 1.59137519e-09-9.17310563e-14    2
-1.37695377e+04-9.96212012e+01-2.19681831e+00 8.73134079e-02-5.63690703e-05    3
 1.77635552e-08-2.12899352e-12-4.67937082e+03 3.86153466e+01                   4
bddm1pe1                c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.19148490E+02 0.28264910E-01-0.81935110E-05 0.11670350E-08-0.66525990E-13    2
 0.86318360E+04-0.72511340E+02-0.19243780E+01 0.83955740E-01-0.62288250E-04    3
 0.24930360E-07-0.43572580E-11 0.14808190E+05 0.37563030E+02                   4

hxol   Thergas 03/11/09 c   6h  14o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21549862E+02 0.27047789E-01-0.79487772E-05 0.11457996E-08-0.65984199E-13    2
-0.48628891E+05-0.83267570E+02 0.81141561E+00 0.69669344E-01-0.33577078E-04    3
 0.35433736E-08 0.12713889E-11-0.41525320E+05 0.29047613E+02                   4
hxol1j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22482292E+02 0.22063365E-01-0.56083791E-05 0.72612771E-09-0.38781407E-13    2
-0.27173000E+05-0.85793098E+02 0.71222562E+00 0.74118391E-01-0.54639553E-04    3
 0.25572145E-07-0.61214796E-11-0.20081686E+05 0.30288425E+02                   4
hxol2j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22697781E+02 0.21681644E-01-0.54581446E-05 0.70162137E-09-0.37287671E-13    2
-0.25245844E+05-0.86885750E+02-0.37227985E+00 0.81834011E-01-0.71817303E-04    3
 0.41214200E-07-0.11262219E-10-0.18015404E+05 0.34805832E+02                   4
hxol3j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22697781E+02 0.21681644E-01-0.54581446E-05 0.70162137E-09-0.37287671E-13    2
-0.25245844E+05-0.86885750E+02-0.37227985E+00 0.81834011E-01-0.71817303E-04    3
 0.41214200E-07-0.11262219E-10-0.18015404E+05 0.34805832E+02                   4
hxol4j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22697781E+02 0.21681644E-01-0.54581446E-05 0.70162137E-09-0.37287671E-13    2
-0.25245844E+05-0.86885750E+02-0.37227985E+00 0.81834011E-01-0.71817303E-04    3
 0.41214200E-07-0.11262219E-10-0.18015404E+05 0.34805832E+02                   4
hxol5j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22492071E+02 0.22073401E-01-0.56212157E-05 0.72989143E-09-0.39119343E-13    2
-0.25209852E+05-0.85840645E+02 0.71245289E+00 0.74159421E-01-0.54550062E-04    3
 0.25326466E-07-0.59960995E-11-0.18121377E+05 0.30276426E+02                   4
hxol6j Thergas 03/11/09 c   6h  13o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23049522E+02 0.21657450E-01-0.55017586E-05 0.71414652E-09-0.38325117E-13    2

-0.24313062E+05-0.89126678E+02-0.20873120E+00 0.79732887E-01-0.64122985E-04    3
 0.32753871E-07-0.82667146E-11-0.16916375E+05 0.34148010E+02                   4
hxol2e Thergas 03/11/09 c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10397997E+02 0.39846901E-01-0.14274876E-04 0.23635549E-08-0.14948219E-12    2
-0.29250982E+05-0.21542839E+02-0.11827134E+01 0.73759466E-01-0.45363660E-04    3
 0.10203822E-07 0.73838966E-12-0.26401270E+05 0.37250317E+02                   4
hxol3e Thergas 03/11/09 c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15118786E+02 0.31917442E-01-0.10543899E-04 0.16495968E-08-0.10035839E-12    2
-0.31849930E+05-0.47401726E+02-0.21422224E+00 0.68753004E-01-0.37878108E-04    3
 0.60431566E-08 0.13189322E-11-0.27205549E+05 0.33527149E+02                   4
hxol4e Thergas 03/11/09 c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15188276E+02 0.31713743E-01-0.10434519E-04 0.16269369E-08-0.98697431E-13    2
-0.31832893E+05-0.47617470E+02 0.99415100E+00 0.64371176E-01-0.33418662E-04    3
 0.48816853E-08 0.11490458E-11-0.27369338E+05 0.27869856E+02                   4
hxol5e Thergas 03/11/09 c   6h  12o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15403831E+02 0.31689961E-01-0.10476589E-04 0.16411094E-08-0.99990064E-13    2
-0.30472693E+05-0.48384148E+02-0.13616599E+00 0.70017464E-01-0.40811883E-04    3
 0.85349283E-08 0.53936781E-12-0.25836010E+05 0.33344719E+02                   4
hxol4e6j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17124643E+02 0.26219647E-01-0.77467594E-05 0.11183324E-08-0.64325105E-13    2
-0.16810605E+05-0.57928169E+02-0.40236548E+00 0.72200626E-01-0.52643438E-04    3
 0.21396145E-07-0.39044848E-11-0.11609947E+05 0.33812244E+02                   4
hxol3e5j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15830283E+02 0.27551135E-01-0.82511406E-05 0.12043312E-08-0.69882536E-13    2
-0.16593891E+05-0.51024460E+02 0.12293350E+01 0.59530564E-01-0.26272312E-04    3
-0.15932861E-08 0.33728491E-11-0.11964743E+05 0.26938328E+02                   4
hxol2e4j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11701837E+02 0.34147222E-01-0.11164345E-04 0.17350765E-08-0.10513692E-12    2
-0.14150063E+05-0.28424934E+02-0.82163036E+00 0.72676592E-01-0.53145395E-04    3
 0.21130846E-07-0.35283337E-11-0.11061903E+05 0.34935806E+02                   4
hxol5e1j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16914904E+02 0.25496118E-01-0.73425654E-05 0.10412980E-08-0.59204079E-13    2
-0.90876328E+04-0.54155273E+02 0.15217836E-01 0.72741203E-01-0.57761365E-04    3
 0.26488088E-07-0.54207507E-11-0.42936123E+04 0.33406052E+02                   4
hxol4e1j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16579920E+02 0.25737891E-01-0.74313880E-05 0.10582750E-08-0.60470827E-13    2
-0.10400832E+05-0.52725304E+02 0.10205320E+01 0.67951180E-01-0.52398522E-04    3
 0.24836664E-07-0.55116124E-11-0.58134136E+04 0.28462067E+02                   4
hxol3e1j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16529938E+02 0.25897969E-01-0.75105518E-05 0.10735526E-08-0.61531950E-13    2
-0.10423725E+05-0.52612991E+02-0.29845476E+00 0.73112123E-01-0.58757189E-04    3
 0.27918370E-07-0.60287361E-11-0.56379604E+04 0.34586117E+02                   4
hxol2e1j Therg 03/11/09 c   6h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11493970E+02 0.34609947E-01-0.11377281E-04 0.17730502E-08-0.10753689E-12    2
-0.14626345E+05-0.27120201E+02 0.48268950E+00 0.63008390E-01-0.30343514E-04    3
-0.63753286E-09 0.38757634E-11-0.11686224E+05 0.29835403E+02                   4
pe1ol5j  Therg 03/11/09 c   5h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15371242E+02 0.24465831E-01-0.70300807E-05 0.99485353E-09-0.56452733E-13    2
-0.18076738E+05-0.48414993E+02-0.11079471E+01 0.73276661E-01-0.64255262E-04    3
 0.33888707E-07-0.80548380E-11-0.13551692E+05 0.36255951E+02                   4
pe1ol4j  Therg 03/11/09 c   5h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14756149E+02 0.24987673E-01-0.72130706E-05 0.10253682E-08-0.58430488E-13    2
-0.18950959E+05-0.44809120E+02-0.27348325E+00 0.68296932E-01-0.56090990E-04    3
 0.27851849E-07-0.62716160E-11-0.14747299E+05 0.32752747E+02                   4
pe1ol3j  Therg 03/11/09 c   5h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15013535E+02 0.24494518E-01-0.69864946E-05 0.98264819E-09-0.55483091E-13    2
-0.19005680E+05-0.46136955E+02-0.13700784E+01 0.76053075E-01-0.73552161E-04    3
 0.43931248E-07-0.11604937E-10-0.14640048E+05 0.37332481E+02                   4
pe1ol2j  Therg 03/11/09 c   5h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15013535E+02 0.24494518E-01-0.69864946E-05 0.98264819E-09-0.55483091E-13    2
-0.19005680E+05-0.46136955E+02-0.13700784E+01 0.76053075E-01-0.73552161E-04    3

 0.43931248E-07-0.11604937E-10-0.14640048E+05 0.37332481E+02                   4
pe1ol1j  Therg 03/11/09 c   5h  11o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14729630E+02 0.25007633E-01-0.72179041E-05 0.10257457E-08-0.58428692E-13    2
-0.20907445E+05-0.44668419E+02-0.27319008E+00 0.68258852E-01-0.56202585E-04    3
 0.28132858E-07-0.64135511E-11-0.16707760E+05 0.32761597E+02                   4
b1ol                    c   4h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.91435995E+01 0.28595477E-01-0.98282644E-05 0.15803877E-08-0.97937724E-13    2
-0.37849437E+05-0.18465485E+02 0.44218194E+00 0.48805356E-01-0.19473842E-04    3
-0.52574882E-08 0.48700098E-11-0.35321887E+05 0.27291992E+02                   4
c4h9o                   c   4h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12659067E+02 0.20147424E-01-0.57643465E-05 0.81346246E-09-0.46084749E-13    2
-0.13337262E+05-0.39007462E+02-0.12030852E+01 0.55087917E-01-0.36066704E-04    3
 0.10500250E-07-0.50728779E-12-0.91740264E+04 0.33845951E+02                   4
b1ol4j Thergas 03/11/09 c   4h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12465141E+02 0.19980581E-01-0.56564277E-05 0.79303186E-09-0.44773508E-13    2
-0.14208223E+05-0.34560707E+02-0.10491301E+01 0.62428992E-01-0.59454713E-04    3
 0.34418985E-07-0.87994334E-11-0.10640951E+05 0.34223316E+02                   4
b1ol3j Thergas 03/11/09 c   4h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11918427E+02 0.20381136E-01-0.57684483E-05 0.80687518E-09-0.45390876E-13    2
-0.15110049E+05-0.31336449E+02-0.15175551E+00 0.57011314E-01-0.50234386E-04    3
 0.27324253E-07-0.66406494E-11-0.11843269E+05 0.30453905E+02                   4
b1ol2j Thergas 03/11/09 c   4h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12107384E+02 0.20010488E-01-0.56141239E-05 0.78110773E-09-0.43821886E-13    2
-0.15137590E+05-0.32283615E+02-0.11773223E+01 0.64278319E-01-0.66529508E-04    3
 0.42248292E-07-0.11567832E-10-0.11743666E+05 0.34732357E+02                   4
b1ol1j Thergas 03/11/09 c   4h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11845606E+02 0.20483272E-01-0.58214596E-05 0.81863988E-09-0.46324520E-13    2
-0.17048014E+05-0.30937805E+02-0.95986515E-01 0.56591619E-01-0.49437302E-04    3
 0.26705953E-07-0.64668115E-11-0.13809711E+05 0.30227381E+02                   4
c4h7oh                  c   4h   8o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.86316795E+01 0.24115048E-01-0.83295718E-05 0.13443313E-08-0.83534030E-13    2
-0.23077914E+05-0.16301521E+02 0.17386409E+01 0.36984906E-01-0.68029703E-05    3
-0.12864734E-07 0.66265257E-11-0.20918418E+05 0.20739588E+02                   4
ch2ch2ch2oh Therg3/11/9 c   3h   7o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12256207E+02 0.11406737E-01-0.27022422E-05 0.33292591E-09-0.17233253E-13    2
-0.11820730E+05-0.35756184E+02-0.26071241E-01 0.46428688E-01-0.46454734E-04    3
 0.29897912E-07-0.85597475E-11-0.81480063E+04 0.28221712E+02                   4
pe1ol4e Thergas 3/11/09 c   5h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12605708E+02 0.27008209E-01-0.89857531E-05 0.14118086E-08-0.86084013E-13    2
-0.26646781E+05-0.35123390E+02 0.74477755E-01 0.58121298E-01-0.33505457E-04    3
 0.65780843E-08 0.66965108E-12-0.22941576E+05 0.30675026E+02                   4
pe1ol2e4e Therg 3/11/09 c   5h   8o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13874816E+02 0.68558626E-01-0.31592517E-04 0.62470082E-08-0.44820067E-12    2
-0.35116621E+04 0.11053284E+03-0.26836379E+01 0.69683440E-01-0.56474775E-04    3
 0.17366865E-07 0.81110970E-12-0.10002988E+05 0.40521790E+02                   4
b1ol3e Thergas 03/11/09 c   4h   8o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.97080307E+01 0.22506746E-01-0.76025153E-05 0.12080829E-08-0.74279409E-13    2
-0.22781420E+05-0.21308998E+02 0.19657157E+00 0.46828806E-01-0.27622958E-04    3
 0.60174132E-08 0.31409364E-12-0.20037518E+05 0.28381794E+02                   4
b1ol2e4j Thergas 3/11/9 c   4h   7o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16290464E+02 0.99948719E-02-0.21964568E-05 0.25396948E-09-0.12488158E-13    2
-0.10474885E+05-0.59064968E+02-0.18572253E+00 0.48897315E-01-0.37177921E-04    3
 0.16389675E-07-0.35925171E-11-0.51073525E+04 0.28853228E+02                   4
b1jol3e Thergas 03/13/9 c   4h   7o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11132282E+02 0.16474331E-01-0.45657389E-05 0.63047878E-09-0.35235293E-13    2
-0.13628945E+04-0.26611565E+02 0.26266938E+00 0.50136890E-01-0.45958703E-04    3
 0.25338164E-07-0.61249209E-11 0.15141096E+04 0.28793510E+02                   4
b1*o4ol Thergas 3/11/09 c   4h   8o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32700994E+01 0.36725547E-01-0.14271147E-04 0.25013616E-08-0.16459536E-12    2
-0.45134094E+05 0.19099010E+02 0.15129855E+01 0.50086584E-01-0.31996788E-04    3
 0.77743394E-08 0.64543862E-12-0.45629203E+05 0.24778343E+02                   4
```

```
b1j*o4ol Thergas 3/11/9 c   4h   7o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.54534001E+01 0.28740194E-01-0.97750453E-05 0.15613870E-08-0.96375246E-13    2
-0.27877859E+05 0.91925850E+01 0.19317925E+01 0.48214782E-01-0.38243015E-04    3
 0.16745849E-07-0.27739965E-11-0.27864812E+05 0.23886303E+02                   4
c2h3ch2oh Thergas3/11/9 c   3h   6o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.84750433E+01 0.15536899E-01-0.51111738E-05 0.79734375E-09-0.48414757E-13    2
-0.19826914E+05-0.17513844E+02 0.97864538E-01 0.36302853E-01-0.21221043E-04    3
 0.38267034E-08 0.63475424E-12-0.17356730E+05 0.26462063E+02                   4
c2h3choh  Thergas3/11/9 c   3h   5o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.92208939E+01 0.11381267E-01-0.30291433E-05 0.40577380E-09-0.22190796E-13    2
-0.51175137E+04-0.21420860E+02 0.99837661E+00 0.29836480E-01-0.13742202E-04    3
-0.13872160E-08 0.22569932E-11-0.25591716E+04 0.22307461E+02                   4
hoc2h4hco Thergas3/11/9 c   3h   6o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16128237E+01 0.30238857E-01-0.11994322E-04 0.21329085E-08-0.14179162E-12    2
-0.41774625E+05 0.25935989E+02 0.17826831E+01 0.37871331E-01-0.24209052E-04    3
 0.56852185E-08 0.68280418E-12-0.42742141E+05 0.21847282E+02                   4
hoc2h4co  Thergas3/11/9 c   3h   5o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38259876E+01 0.22178184E-01-0.74392960E-05 0.11771862E-08-0.72216823E-13    2
-0.24526432E+05 0.15867889E+02 0.21212866E+01 0.36554631E-01-0.31785286E-04    3
 0.15980717E-07-0.32039842E-11-0.24969154E+05 0.21288528E+02                   4
c5h9hco-1 Thergas3/11/9 c   6h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.72028861E+01 0.40368307E-01-0.15310066E-04 0.26394638E-08-0.17175355E-12    2
-0.18916467E+05-0.30190735E+01 0.89051771E+00 0.62941328E-01-0.38590413E-04    3
 0.86810692E-08 0.77071547E-12-0.17829389E+05 0.27402893E+02                   4
c5h9co-1  Thergas3/11/9 c   6h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.93050137E+01 0.32596160E-01-0.10980964E-04 0.17424291E-08-0.10707088E-12    2
-0.16398086E+04-0.12503784E+02 0.11773859E+01 0.61985154E-01-0.47036006E-04    3
 0.19846773E-07-0.34246675E-11-0.50896812E+02 0.27073027E+02                   4
c5h9hco-2 Thergas3/11/9 c   6h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18041243E+02 0.22334302E-01-0.68217723E-05 0.10099359E-08-0.59180810E-13    2
-0.24727076E+05-0.64257561E+02 0.25933149E+01 0.54156996E-01-0.26255844E-04    3
 0.32357192E-08 0.76497825E-12-0.19433750E+05 0.19399313E+02                   4
c5h9co-2  Thergas3/11/9 c   6h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.18720741E+02 0.17609492E-01-0.45559932E-05 0.60145611E-09-0.32762431E-13    2
-0.69783066E+04-0.66084435E+02 0.29627173E+01 0.52617282E-01-0.33274609E-04    3
 0.12955472E-07-0.29121970E-11-0.16639211E+04 0.18721508E+02                   4
c5h9hco-3  3/12/ 9 THERMc   6h  10o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 1.83335573E+01 2.42384336E-02-8.34179624E-06 1.30049092E-09-7.56713528E-14    2
-2.46440352E+04-6.60228761E+01-7.43098070E-01 6.75191419E-02-4.59641521E-05    3
 1.62972308E-08-2.39792598E-12-1.78448055E+04 3.69629712E+01                   4
c5h9co-3   3/12/ 9 THERMc   6h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 1.79164768E+01 2.21089552E-02-7.62133514E-06 1.18949022E-09-6.92667918E-14    2
-5.68199822E+03-6.21132884E+01 3.35169089E-02 6.27096053E-02-4.28992287E-05    3
 1.52253216E-08-2.23544811E-12 6.83088437E+02 3.44086825E+01                   4
pc2h4oh Thergas 03/11/9 c   2h   5o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.88886824E+01 0.78479201E-02-0.17513548E-05 0.20706463E-09-0.10460966E-13    2
-0.74369263E+04-0.19581196E+02-0.25759500E+00 0.37653532E-01-0.43723256E-04    3
 0.30313863E-07-0.87933515E-11-0.49729438E+04 0.26939510E+02                   4
Ec5h9-2 Thergas 03/11/9 c   5h   9o   0     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14732062E+02 0.16907906E-01-0.44439362E-05 0.58846739E-09-0.31853091E-13    2
 0.14033660E+05-0.50276833E+02-0.63068593E+00 0.58983412E-01-0.53108502E-04    3
 0.30802898E-07-0.82889589E-11 0.18677992E+05 0.30094849E+02                   4
hoch2hco Thergas 3/12/9 c   2h   4o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.69808908E+01 0.12018369E-01-0.39691918E-05 0.62074579E-09-0.37748216E-13    2
-0.40600430E+05-0.67540932E+01 0.31326690E+01 0.21118322E-01-0.10699493E-04    3
 0.18237936E-08 0.23164963E-12-0.39413391E+05 0.13625314E+02                   4
hoch2co Thergas 03/12/9 c   2h   3o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.76963177E+01 0.72258459E-02-0.16582704E-05 0.19945856E-09-0.10153849E-13    2
-0.22865857E+05-0.87998276E+01 0.35328012E+01 0.19371565E-01-0.17235248E-04    3
 0.11074379E-07-0.32834766E-11-0.21646941E+05 0.12796853E+02                   4
c4h5hco    3/12/ 9 THERMc   5h   6o   1    0G   300.000  5000.000 1401.000    01
```

```
 1.53488601E+01 1.54830378E-02-5.26285597E-06 8.13473320E-10-4.70448195E-14    2
-1.02765238E+04-5.50256799E+01-1.52615800E+00 6.47643668E-02-6.18436511E-05    3
 3.04045002E-08-5.88284777E-12-5.33658593E+03 3.22148883E+01                   4
c4h5co     3/12/ 9 THERMc   5h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1402.000    01
 1.48655287E+01 1.32808262E-02-4.48801883E-06 6.90874722E-10-3.98371953E-14    2
 5.82650903E+03-5.16972291E+01-3.01693053E-01 5.98659148E-02-6.02865512E-05    3
 3.08047773E-08-6.11041306E-12 1.00527023E+04 2.59270126E+01                   4
pe1jol4e Therga 3/12/9 c   5h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14010012E+02 0.21007648E-01-0.59665599E-05 0.83889390E-09-0.47477555E-13    2
-0.53199082E+04-0.40305267E+02 0.26476195E-01 0.62217515E-01-0.53725791E-04    3
 0.27771296E-07-0.64291055E-11-0.14783392E+04 0.31577261E+02                   4
pe1ol3e5j Therga 3/12/9 c   5h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14229529E+02 0.21710645E-01-0.63574253E-05 0.91302454E-09-0.52390990E-13    2
-0.12946436E+05-0.44134422E+02-0.13339677E+00 0.59870299E-01-0.44248085E-04    3
 0.18315852E-07-0.33655175E-11-0.87211973E+04 0.30894175E+02                   4
pe1jol2e4e Therg 3/12/9 c   5h   7o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
-0.11709788E+02 0.60233414E-01-0.26089647E-04 0.49372506E-08-0.34314964E-12    2
 0.10886288E+05 0.99551682E+02-0.10080047E+01 0.58838211E-01-0.41218689E-04    3
 0.63007590E-08 0.40204593E-11 0.47115229E+04 0.33040699E+02                   4
!Low T
hxol1o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40377087E+02 0.43189088E-02-0.32369840E-06 0.10490661E-10 0.13205987E-15    2
-0.52389164E+05-0.18438222E+03-0.64034426E+00 0.86837769E-01-0.53190346E-04    3
 0.12741907E-07-0.13678343E-11-0.37918207E+05 0.38968811E+02                   4
hxol2o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42040768E+02 0.31667058E-02-0.21449976E-06 0.12211762E-10-0.54071894E-15    2
-0.51203500E+05-0.19235538E+03 0.20860715E+01 0.79097122E-01-0.44389239E-04    3
 0.96198347E-08-0.14092456E-11-0.36609266E+05 0.26948479E+02                   4
hxol3o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42040768E+02 0.31667058E-02-0.21449976E-06 0.12211762E-10-0.54071894E-15    2
-0.51203594E+05-0.19235583E+03 0.21384163E+01 0.78737736E-01-0.43534565E-04    3
 0.87745162E-08-0.11124983E-11-0.36614922E+05 0.26726061E+02                   4
hxol4o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42040768E+02 0.31667058E-02-0.21449976E-06 0.12211762E-10-0.54071894E-15    2
-0.51203500E+05-0.19235532E+03 0.20860715E+01 0.79097122E-01-0.44389239E-04    3
 0.96198347E-08-0.14092456E-11-0.36609266E+05 0.26948555E+02                   4
hxol5o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42040768E+02 0.31667058E-02-0.21449976E-06 0.12211762E-10-0.54071894E-15    2
-0.51475195E+05-0.19235397E+03 0.20637615E+01 0.79252511E-01-0.44763201E-04    3
 0.99932951E-08-0.15413744E-11-0.36878625E+05 0.27044125E+02                   4
hxol6o2 Thergas 3/19/09 c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.20850794E+02 0.32383662E-01-0.96921058E-05 0.14157782E-08-0.82291412E-13    2
-0.39802949E+05-0.70803276E+02 0.42034429E+00 0.86995691E-01-0.58622158E-04    3
 0.16782824E-07-0.71152112E-12-0.34084410E+05 0.35213230E+02                   4
hxol1o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40971199E+02 0.55416101E-02-0.57162652E-06 0.34386289E-10-0.98130154E-15    2
-0.70321445E+05-0.18664987E+03 0.53943789E+00 0.83977379E-01-0.44896195E-04    3
 0.54957443E-08 0.85465180E-12-0.55869180E+05 0.34334999E+02                   4
hxol2o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42749195E+02 0.41815196E-02-0.34956062E-06 0.16808350E-10-0.35320141E-15    2
-0.69179156E+05-0.19456068E+03 0.32391951E+01 0.76432317E-01-0.36588917E-04    3
 0.28876461E-08 0.62495983E-12-0.54557543E+05 0.23120331E+02                   4
hxol3o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42749195E+02 0.41815196E-02-0.34956062E-06 0.16808350E-10-0.35320141E-15    2
-0.69179156E+05-0.19456068E+03 0.32391951E+01 0.76432317E-01-0.36588917E-04    3
 0.28876461E-08 0.62495983E-12-0.54557543E+05 0.23120331E+02                   4
hxol4o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42749195E+02 0.41815196E-02-0.34956062E-06 0.16808350E-10-0.35320141E-15    2
-0.69179156E+05-0.19456068E+03 0.32391951E+01 0.76432317E-01-0.36588917E-04    3
 0.28876461E-08 0.62495983E-12-0.54557543E+05 0.23120331E+02                   4
hxol5o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
```

```
 0.42706726E+02 0.42574424E-02-0.39419976E-06 0.27307321E-10-0.12105048E-14    2
-0.69433984E+05-0.19501727E+03 0.32200041E+01 0.76573946E-01-0.36946214E-04    3
 0.32560312E-08 0.49217244E-12-0.54827363E+05 0.22507261E+02                   4
hxol6o2h Thergas 3/19/9 c   6h  14o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.19790939E+02 0.36932029E-01-0.11984826E-04 0.18501379E-08-0.11145285E-12    2
-0.57159352E+05-0.64075897E+02 0.15237179E+01 0.84674992E-01-0.51645737E-04    3
 0.10870327E-07 0.10335249E-11-0.52027352E+05 0.30904116E+02                   4
hxol1o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.37551144E+02 0.46787024E-02-0.42779283E-06 0.27691910E-10-0.11117922E-14    2
-0.50672633E+05-0.17236607E+03-0.19853777E+01 0.82333386E-01-0.47971320E-04    3
 0.10505519E-07-0.10552669E-11-0.36524238E+05 0.43630539E+02                   4
hxol2o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39291504E+02 0.33885709E-02-0.23943582E-06 0.12315529E-10-0.43267385E-15    2
-0.49114312E+05-0.18076505E+03 0.63593864E+00 0.75322196E-01-0.40922576E-04    3
 0.91313810E-08-0.17144349E-11-0.34801480E+05 0.32054897E+02                   4
hxol3o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39291504E+02 0.33885709E-02-0.23943582E-06 0.12315529E-10-0.43267385E-15    2
-0.49114406E+05-0.18076556E+03 0.68828356E+00 0.74962802E-01-0.40067902E-04    3
 0.82860652E-08-0.14176867E-11-0.34807133E+05 0.31832438E+02                   4
hxol4o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39291504E+02 0.33885709E-02-0.23943582E-06 0.12315529E-10-0.43267385E-15    2
-0.49114312E+05-0.18076494E+03 0.63593864E+00 0.75322196E-01-0.40922576E-04    3
 0.91313810E-08-0.17144349E-11-0.34801480E+05 0.32054993E+02                   4
hxol5o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.39291504E+02 0.33885709E-02-0.23943582E-06 0.12315529E-10-0.43267385E-15    2
-0.49386023E+05-0.18076334E+03 0.61723459E+00 0.75459100E-01-0.41267886E-04    3
 0.94905941E-08-0.18459878E-11-0.35071328E+05 0.32134689E+02                   4
hxol6o  Thergas 03/19/9 c   6h  13o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17644072E+02 0.33509247E-01-0.10263610E-04 0.15244941E-08-0.89640426E-13    2
-0.38608004E+05-0.56716545E+02-0.12793858E+01 0.84957093E-01-0.59335172E-04    3
 0.20470329E-07-0.24945005E-11-0.33306770E+05 0.41375938E+02                   4
hocho FORMIC ACID L 8/88h   2c   1o   2    0G   200.000  6000.000 1000.      1
 0.46138316E+01 0.64496364E-02-0.22908251E-05 0.36716047E-09-0.21873675E-13    2
-0.47514850E+05 0.84788383E+00 0.38983616E+01-0.35587795E-02 0.35520538E-04    3
-0.43849959E-07 0.17107769E-10-0.46770609E+05 0.73495397E+01-0.45531246E+05    4
hoco             ATcT/Ac  1.o  2.h  1.   0.G   200.000  6000.000 1000.      1
 5.39206152E+00 4.11221455E-03-1.48194900E-06 2.39875460E-10-1.43903104E-14    2
-2.38606717E+04-2.23529091E+00 2.92207919E+00 7.62453859E-03 3.29884437E-06    3
-1.07135205E-08 5.11587057E-12-2.30281524E+04 1.12925886E+01-2.18076591E+04    4
hcoo formyloxyl   T05/06h  1.c  1.o  2.   0.G   200.000  6000.000 1000.      1
 4.14394211E+00 5.59738818E-03-1.99794019E-06 3.16179193E-10-1.85614483E-14    2
-1.72459887E+04 5.07778617E+00 4.68825921E+00-4.14871834E-03 2.55066010E-05    3
-2.84473900E-08 1.04422559E-11-1.69867041E+04 4.28426480E+00-1.55992356E+04    4
hxol2j1o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40276569E+02 0.37859734E-02-0.22988029E-06 0.12959010E-11 0.61451923E-15    2
-0.46257219E+05-0.18031586E+03-0.54315090E+00 0.95444962E-01-0.81472826E-04    3
 0.41516682E-07-0.11098558E-10-0.32345025E+05 0.39555592E+02                   4
hxol3j1o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40276569E+02 0.37859734E-02-0.22988029E-06 0.12959010E-11 0.61451923E-15    2
-0.46257219E+05-0.18031586E+03-0.54315090E+00 0.95444962E-01-0.81472826E-04    3
 0.41516682E-07-0.11098558E-10-0.32345025E+05 0.39555592E+02                   4
hxol4j1o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.40276569E+02 0.37859734E-02-0.22988029E-06 0.12959010E-11 0.61451923E-15    2
-0.46257219E+05-0.18031586E+03-0.54315090E+00 0.95444962E-01-0.81472826E-04    3
 0.41516682E-07-0.11098558E-10-0.32345025E+05 0.39555592E+02                   4
hxol1j2o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41880825E+02 0.27204677E-02-0.95718889E-07-0.90791047E-11 0.10953025E-14    2
-0.47057016E+05-0.18736108E+03 0.32569518E+01 0.80076613E-01-0.55734312E-04    3
 0.23018169E-07-0.61010567E-11-0.33101402E+05 0.23756126E+02                   4
hxol3j2o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41862270E+02 0.27711783E-02-0.19561054E-06 0.17300533E-10-0.11102410E-14    2
```

```
-0.45040809E+05-0.18716089E+03 0.22694039E+01 0.87118752E-01-0.71292860E-04    3
 0.37043428E-07-0.10669627E-10-0.31045475E+05 0.27863079E+02                   4
hxol4j2o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41862270E+02 0.27711783E-02-0.19561054E-06 0.17300533E-10-0.11102410E-14    2
-0.45040809E+05-0.18716089E+03 0.22694039E+01 0.87118752E-01-0.71292860E-04    3
 0.37043428E-07-0.10669627E-10-0.31045475E+05 0.27863079E+02                   4
hxol5j2o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41847206E+02 0.28088007E-02-0.15436116E-06 0.50308572E-11-0.66618718E-16    2
-0.45076691E+05-0.18716727E+03 0.32114878E+01 0.80426566E-01-0.56367979E-04    3
 0.23477121E-07-0.62196828E-11-0.31136082E+05 0.23938759E+02                   4
hxol1j3o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41880825E+02 0.27204677E-02-0.95718889E-07-0.90791047E-11 0.10953025E-14    2
-0.47057016E+05-0.18736108E+03 0.32569518E+01 0.80076613E-01-0.55734312E-04    3
 0.23018169E-07-0.61010567E-11-0.33101402E+05 0.23756126E+02                   4
hxol2j3o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41862270E+02 0.27711783E-02-0.19561054E-06 0.17300533E-10-0.11102410E-14    2
-0.45040809E+05-0.18716089E+03 0.22694039E+01 0.87118752E-01-0.71292860E-04    3
 0.37043428E-07-0.10669627E-10-0.31045475E+05 0.27863079E+02                   4
hxol5j3o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41847206E+02 0.28088007E-02-0.15436116E-06 0.50308572E-11-0.66618718E-16    2
-0.45076691E+05-0.18716727E+03 0.32114878E+01 0.80426566E-01-0.56367979E-04    3
 0.23477121E-07-0.62196828E-11-0.31136082E+05 0.23938759E+02                   4
hxol6j3o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42309250E+02 0.25755123E-02-0.13674567E-06 0.52917102E-11-0.15752154E-15    2
-0.44145871E+05-0.18993155E+03 0.23811879E+01 0.85377008E-01-0.64461383E-04    3
 0.29443028E-07-0.79778181E-11-0.29940916E+05 0.27424404E+02                   4
hxol1j4o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41880825E+02 0.27204677E-02-0.95718889E-07-0.90791047E-11 0.10953025E-14    2
-0.47057016E+05-0.18736108E+03 0.32569518E+01 0.80076613E-01-0.55734312E-04    3
 0.23018169E-07-0.61010567E-11-0.33101402E+05 0.23756126E+02                   4
hxol2j4o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41862270E+02 0.27711783E-02-0.19561054E-06 0.17300533E-10-0.11102410E-14    2
-0.45040809E+05-0.18716089E+03 0.22694039E+01 0.87118752E-01-0.71292860E-04    3
 0.37043428E-07-0.10669627E-10-0.31045475E+05 0.27863079E+02                   4
hxol3j4o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41862270E+02 0.27711783E-02-0.19561054E-06 0.17300533E-10-0.11102410E-14    2
-0.45040809E+05-0.18716089E+03 0.22694039E+01 0.87118752E-01-0.71292860E-04    3
 0.37043428E-07-0.10669627E-10-0.31045475E+05 0.27863079E+02                   4
hxol5j4o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41847206E+02 0.28088007E-02-0.15436116E-06 0.50308572E-11-0.66618718E-16    2
-0.45076691E+05-0.18716727E+03 0.32114878E+01 0.80426566E-01-0.56367979E-04    3
 0.23477121E-07-0.62196828E-11-0.31136082E+05 0.23938759E+02                   4
hxol6j4o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.42309250E+02 0.25755123E-02-0.13674567E-06 0.52917102E-11-0.15752154E-15    2
-0.44145871E+05-0.18993155E+03 0.23811879E+01 0.85377008E-01-0.64461383E-04    3
 0.29443028E-07-0.79778181E-11-0.29940916E+05 0.27424404E+02                   4
hxol2j5o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41927013E+02 0.26569990E-02-0.12892728E-06 0.15272589E-11 0.18684753E-15    2
-0.45338422E+05-0.18821448E+03 0.20572984E+01 0.88600107E-01-0.74871503E-04    3
 0.40629356E-07-0.11941517E-10-0.31294684E+05 0.28066740E+02                   4
hxol3j5o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41927013E+02 0.26569990E-02-0.12892728E-06 0.15272589E-11 0.18684753E-15    2
-0.45338422E+05-0.18821448E+03 0.20572984E+01 0.88600107E-01-0.74871503E-04    3
 0.40629356E-07-0.11941517E-10-0.31294684E+05 0.28066740E+02                   4
hxol4j5o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.41927013E+02 0.26569990E-02-0.12892728E-06 0.15272589E-11 0.18684753E-15    2
-0.45338422E+05-0.18821448E+03 0.20572984E+01 0.88600107E-01-0.74871503E-04    3
```

```
 0.40629356E-07-0.11941517E-10-0.31294684E+05 0.28066740E+02                4
hxolj5o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42321568E+02 0.25534653E-02-0.12354823E-06 0.20439772E-11 0.11892102E-15   2
-0.44774734E+05-0.19069299E+03 0.23164306E+01 0.85832074E-01-0.65564833E-04   3
 0.30549792E-07-0.83698404E-11-0.30558088E+05 0.27004660E+02                4
hxolj3j6o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21447872E+02 0.30484004E-01-0.87785820E-05 0.12452502E-08-0.70831450E-13   2
-0.33919844E+05-0.69850899E+02 0.23317747E+00 0.97583592E-01-0.91679074E-04   3
 0.50334975E-07-0.12135546E-10-0.28480934E+05 0.37698620E+02                4
hxol4j6o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21447872E+02 0.30484004E-01-0.87785820E-05 0.12452502E-08-0.70831450E-13   2
-0.33919844E+05-0.69850899E+02 0.23317747E+00 0.97583592E-01-0.91679074E-04   3
 0.50334975E-07-0.12135546E-10-0.28480934E+05 0.37698620E+02                4
hxol5j6o2h Therga 3/19/9c   6h  13o   3     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21447872E+02 0.30484004E-01-0.87785820E-05 0.12452502E-08-0.70831450E-13   2
-0.33919844E+05-0.69850899E+02 0.23317747E+00 0.97583592E-01-0.91679074E-04   3
 0.50334975E-07-0.12135546E-10-0.28480934E+05 0.37698620E+02                4
hxolcy2o1  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32305805E+02 0.10309517E-01-0.19488864E-05 0.20362931E-09-0.94954443E-14   2
-0.55431438E+05-0.14628180E+03-0.24116578E+01 0.82186557E-01-0.46908659E-04   3
 0.67472157E-08 0.12431475E-11-0.43552328E+05 0.41646427E+02                4
hxolcy3o1  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.39920601E+02 0.13707936E+00-0.67307890E-04 0.13932466E-07-0.10340232E-11   2
-0.29066539E+05 0.25219193E+03-0.73354735E+01 0.10156211E+00-0.77118253E-04   3
 0.23417225E-07 0.15796003E-11-0.43516836E+05 0.63709278E+02                4
hxolcy4o1  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14461571E+01 0.61970916E-01-0.25704858E-04 0.47172146E-08-0.32068047E-12   2
-0.53187605E+05 0.24052670E+02-0.46796465E+01 0.10051078E+00-0.75412347E-04   3
 0.20308892E-07 0.12915156E-11-0.53982926E+05 0.47081829E+02                4
hxolcy3o2  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21277317E+02 0.27808554E-01-0.88000752E-05 0.13337527E-08-0.79296629E-13   2
-0.48841406E+05-0.82120705E+02-0.82041919E+00 0.80983594E-01-0.49658243E-04   3
 0.10157412E-07 0.86319287E-12-0.42106211E+05 0.34602257E+02                4
hxolcy4o2  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13457664E+02 0.36125451E-01-0.12698253E-04 0.20762119E-08-0.13025334E-12   2
-0.27693887E+05-0.44348137E+02-0.48016610E+01 0.82411908E-01-0.50289353E-04   3
 0.10739180E-07 0.74853643E-12-0.22388922E+05 0.51184555E+02                4
hxolcy5o2  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.15739325E+02 0.94229773E-01-0.43550528E-04 0.86299492E-08-0.62014700E-12   2
-0.45077203E+05 0.12061170E+03-0.29847374E+01 0.98595783E-01-0.76474142E-04   3
 0.22062531E-07 0.14864795E-11-0.52819727E+05 0.39597748E+02                4
hxolcy4o3  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21277317E+02 0.27808554E-01-0.88000752E-05 0.13337527E-08-0.79296629E-13   2
-0.48841406E+05-0.82120705E+02-0.82041919E+00 0.80983594E-01-0.49658243E-04   3
 0.10157412E-07 0.86319287E-12-0.42106211E+05 0.34602257E+02                4
hxolcy5o3  3/20/ 9 THERMc   6h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1399.000    41
 2.27001584E+01 2.81146257E-02-9.66575969E-06 1.50578511E-09-8.75697498E-14   2
-5.04209725E+04-9.32884451E+01-6.66644565E+00 1.05820988E-01-9.05820794E-05   3
 4.04151858E-08-7.27020345E-12-4.10911040E+04 6.12680720E+01                4
hxolcy6o3  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.11638434E+02 0.86147130E-01-0.38920109E-04 0.75884214E-08-0.53889711E-12   2
-0.44143375E+05 0.99197098E+02-0.26245136E+01 0.95162116E-01-0.71966009E-04   3
 0.20778131E-07 0.10857318E-11-0.50271844E+05 0.39636368E+02                4
hxolcy5o4  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.21277317E+02 0.27808554E-01-0.88000752E-05 0.13337527E-08-0.79296629E-13   2
-0.49113145E+05-0.82120705E+02-0.82041919E+00 0.80983594E-01-0.49658243E-04   3
 0.10157412E-07 0.86319287E-12-0.42377953E+05 0.34602257E+02                4
hxolcy6o4  3/20/ 9 THERMc   6h  12o   2    0G   300.000  5000.000 1401.000    41
 2.18107457E+01 2.86478263E-02-9.80108443E-06 1.52189067E-09-8.83058776E-14   2
-4.79022274E+04-8.82837686E+01-4.73319176E+00 9.47700539E-02-7.38591192E-05   3
 3.01010684E-08-5.00695030E-12-3.91054607E+04 5.27957542E+01                4
```

```
hxolcy6o5  Therga 3/19/9c   6h  12o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.24363197E+02 0.22544447E-01-0.64914593E-05 0.91932473E-09-0.52154309E-13   2
-0.47945922E+05-0.98377869E+02-0.28230664E+00 0.76319970E-01-0.42205153E-04   3
 0.59423977E-08 0.14967600E-11-0.39849164E+05 0.33886982E+02                4
hxol1o2h2o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065719E+05-0.96952400E+02-0.58393812E+00 0.10780547E+00-0.81915146E-04   3
 0.25096661E-07-0.10196833E-11-0.50970234E+05 0.42758972E+02                4
hxol1o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065719E+05-0.96952240E+02-0.58393812E+00 0.10780547E+00-0.81915146E-04   3
 0.25096661E-07-0.10196833E-11-0.50970234E+05 0.42759136E+02                4
hxol1o2h4o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065977E+05-0.96952431E+02-0.44184825E+00 0.10682300E+00-0.79562844E-04   3
 0.22756133E-07-0.19382266E-12-0.50985488E+05 0.42157448E+02                4
hxol2o2h1o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065832E+05-0.96257744E+02-0.51650345E+00 0.10733779E+00-0.80791477E-04   3
 0.23974913E-07-0.62270057E-12-0.50977453E+05 0.43168327E+02                4
hxol2o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18935173E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.35965488E+02                4
hxol2o2h4o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18934692E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.35965973E+02                4
hxol2o2h5o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944707E+05-0.19894363E+02 0.11088034E+01 0.10592248E+00-0.83095125E-04   3
 0.27007351E-07-0.89305597E-12-0.49807039E+05 0.35283653E+02                4
hxol3o2h1o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065832E+05-0.96257744E+02-0.51650345E+00 0.10733779E+00-0.80791477E-04   3
 0.23974913E-07-0.62270057E-12-0.50977453E+05 0.43168327E+02                4
hxol3o2h2o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18241707E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.36658958E+02                4
hxol3o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18934692E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.35965973E+02                4
hxol3o2h5o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944707E+05-0.19894363E+02 0.11088034E+01 0.10592248E+00-0.83095125E-04   3
 0.27007351E-07-0.89305597E-12-0.49807039E+05 0.35283653E+02                4
hxol3o2h6o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45932430E+02 0.39958684E-02-0.25026318E-06 0.11687609E-11 0.71888533E-15   2
-0.62385641E+05-0.20422137E+03 0.37775304E+01 0.89563765E-01-0.57169393E-04   3
 0.15987991E-07-0.24792200E-11-0.47542363E+05 0.25157055E+02                4
hxol4o2h1o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26704115E+02 0.30013746E-01-0.84379963E-05 0.11776083E-08-0.66305970E-13   2
-0.58065832E+05-0.96257744E+02-0.51650345E+00 0.10733779E+00-0.80791477E-04   3
 0.23974913E-07-0.62270057E-12-0.50977453E+05 0.43168327E+02                4
hxol4o2h2o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18241707E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.36658958E+02                4
hxol4o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.13114470E+02 0.52839946E-01-0.18762084E-04 0.30878369E-08-0.19450899E-12   2
-0.50603707E+05-0.18242134E+02 0.94804019E+00 0.10701675E+00-0.85668435E-04   3
 0.29517498E-07-0.17603198E-11-0.49517816E+05 0.36658535E+02                4
hxol4o2h5o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944707E+05-0.19894363E+02 0.11088034E+01 0.10592248E+00-0.83095125E-04   3
 0.27007351E-07-0.89305597E-12-0.49807039E+05 0.35283653E+02                4
hxol4o2h6o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45932430E+02 0.39958684E-02-0.25026318E-06 0.11687609E-11 0.71888533E-15   2
-0.62385852E+05-0.20491483E+03 0.39043479E+01 0.88685058E-01-0.55061602E-04   3
 0.13887572E-07-0.17371434E-11-0.47555945E+05 0.23927017E+02                4
hxol5o2h2o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944648E+05-0.19895599E+02 0.10752649E+01 0.10614425E+00-0.83602819E-04   3
 0.27491804E-07-0.10576712E-11-0.49803289E+05 0.35425831E+02                4
hxol5o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944625E+05-0.19895958E+02 0.10601964E+01 0.10624660E+00-0.83844010E-04   3
 0.27728559E-07-0.11402706E-11-0.49801645E+05 0.35489540E+02                4
hxol5o2h4o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13285737E+02 0.52558154E-01-0.18627334E-04 0.30615530E-08-0.19266907E-12   2
-0.50944625E+05-0.19896080E+02 0.10601964E+01 0.10624660E+00-0.83844010E-04   3
 0.27728559E-07-0.11402706E-11-0.49801645E+05 0.35489418E+02                4
hxol5o2h6o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45924774E+02 0.40098997E-02-0.25868917E-06 0.31813697E-11 0.55235214E-15   2
-0.62383250E+05-0.20487308E+03 0.41174722E+01 0.87215565E-01-0.51551160E-04   3
 0.10400377E-07-0.50795620E-12-0.47578891E+05 0.23023500E+02                4
hxol6o2h3o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45924774E+02 0.40098997E-02-0.25868917E-06 0.31813697E-11 0.55235214E-15   2
-0.62383246E+05-0.20418005E+03 0.41174722E+01 0.87215565E-01-0.51551160E-04   3
 0.10400377E-07-0.50795620E-12-0.47578887E+05 0.23716350E+02                4
hxol6o2h4o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45924774E+02 0.40098997E-02-0.25868917E-06 0.31813697E-11 0.55235214E-15   2
-0.62383246E+05-0.20418018E+03 0.41174722E+01 0.87215565E-01-0.51551160E-04   3
 0.10400377E-07-0.50795620E-12-0.47578887E+05 0.23716406E+02                4
hxol6o2h5o2 Therga3/19/9c   6h  13o   5     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.45932430E+02 0.39958684E-02-0.25026318E-06 0.11687609E-11 0.71888533E-15   2
-0.62385883E+05-0.20422157E+03 0.39194164E+01 0.88582702E-01-0.54820412E-04   3
 0.13650818E-07-0.16545440E-11-0.47557594E+05 0.24556210E+02                4
hxol1*o2o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.25340055E+02 0.27953602E-01-0.85495813E-05 0.12663828E-08-0.74203888E-13   2
-0.83336625E+05-0.94511154E+02 0.83949298E+00 0.90690732E-01-0.59208054E-04   3
 0.11873232E-07 0.17259729E-11-0.76330219E+05 0.33339180E+02                4
hxol1*o3o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60011911E+01 0.80209978E-01-0.34337663E-04 0.64437717E-08-0.44512289E-12   2
-0.71560219E+05 0.81090683E+02 0.38652489E+00 0.97089656E-01-0.74306612E-04   3
 0.21160380E-07 0.14035731E-11-0.77113680E+05 0.34702991E+02                4
hxol1*o4o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60011911E+01 0.80209978E-01-0.34337663E-04 0.64437717E-08-0.44512289E-12   2
-0.71560219E+05 0.81090683E+02 0.38652489E+00 0.97089656E-01-0.74306612E-04   3
 0.21160380E-07 0.14035731E-11-0.77113680E+05 0.34702991E+02                4
hxol2*o1o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.22114157E+02 0.30648803E-01-0.94667448E-05 0.14131901E-08-0.83306680E-13   2
-0.76760523E+05-0.75056633E+02 0.60759884E+00 0.87976739E-01-0.58359503E-04   3
 0.13432119E-07 0.95682880E-12-0.70833109E+05 0.36357502E+02                4
hxol2*o3o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.52189879E+01 0.60182843E-01-0.23789449E-04 0.42205563E-08-0.28013434E-12   2
-0.65631086E+05 0.21392197E+02 0.16312675E+01 0.89750454E-01-0.64963206E-04   3
 0.18688981E-07 0.38025534E-12-0.66851773E+05 0.32206650E+02                4
hxol2*o4o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16362799E+01 0.65739103E-01-0.26535241E-04 0.47781055E-08-0.32052169E-12   2
```

```
-0.64836141E+05 0.41895569E+02 0.30715120E+01 0.84989078E-01-0.59390404E-04   3
 0.14751680E-07 0.17942430E-11-0.67860992E+05 0.25305735E+02                4
hxol2*o5o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16362799E+01 0.65739103E-01-0.26535241E-04 0.47781055E-08-0.32052169E-12   2
-0.65107883E+05 0.41202484E+02 0.30715120E+01 0.84989078E-01-0.59390404E-04   3
 0.14751680E-07 0.17942430E-11-0.68132727E+05 0.24612652E+02                4
hxol3*o1o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10641276E+02 0.49088471E-01-0.17971841E-04 0.30223819E-08-0.19328201E-12   2
-0.70871891E+05-0.10271637E+02 0.11673772E+00 0.92668980E-01-0.66955370E-04   3
 0.17631367E-07 0.10872245E-11-0.69718117E+05 0.38150768E+02                4
hxol3*o2o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.22560942E+01 0.73071048E-01-0.30449772E-04 0.56066334E-08-0.38207198E-12   2
-0.63325602E+05 0.63252163E+02 0.51000506E+00 0.94580062E-01-0.71407238E-04   3
 0.21205107E-07 0.59710684E-12-0.67289172E+05 0.37670063E+02                4
hxol3*o4o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.23067946E+01 0.73158450E-01-0.30494715E-04 0.56158966E-08-0.38274511E-12   2
-0.63306336E+05 0.63533192E+02 0.79364818E+00 0.92600971E-01-0.66624511E-04   3
 0.16403700E-07 0.23054536E-11-0.67319359E+05 0.36470482E+02                4
hxol3*o5o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60096698E+01 0.79014391E-01-0.33470555E-04 0.62349352E-08-0.42845740E-12   2
-0.62749719E+05 0.83971703E+02 0.18148596E+01 0.90738356E-01-0.67992820E-04   3
 0.19370461E-07 0.12849256E-11-0.68555367E+05 0.30652079E+02                4
hxol3*o6o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16978621E+01 0.70926063E-01-0.29112853E-04 0.53037117E-08-0.35869840E-12   2
-0.61958410E+05 0.61208054E+02 0.22228823E+01 0.86972326E-01-0.62686500E-04   3
 0.17291423E-07 0.11642108E-11-0.66012578E+05 0.30488441E+02                4
hxol4*o1o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10641276E+02 0.49088471E-01-0.17971841E-04 0.30223819E-08-0.19328201E-12   2
-0.70871891E+05-0.10271629E+02 0.11673772E+00 0.92668980E-01-0.66955370E-04   3
 0.17631367E-07 0.10872245E-11-0.69718117E+05 0.38150772E+02                4
hxol4*o2o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60096698E+01 0.79014391E-01-0.33470555E-04 0.62349352E-08-0.42845740E-12   2
-0.62477984E+05 0.84664787E+02 0.18148596E+01 0.90738356E-01-0.67992820E-04   3
 0.19370461E-07 0.12849256E-11-0.68283633E+05 0.31345161E+02                4
hxol4*o3o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.22397280E+01 0.73039658E-01-0.30426305E-04 0.56000040E-08-0.38145759E-12   2
-0.63332523E+05 0.63160938E+02 0.48586988E+00 0.94735675E-01-0.71753391E-04   3
 0.21524984E-07 0.49220187E-12-0.67286414E+05 0.37773964E+02                4
hxol4*o5o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.22560942E+01 0.73071048E-01-0.30449772E-04 0.56066334E-08-0.38207198E-12   2
-0.63325602E+05 0.62559086E+02 0.51000506E+00 0.94580062E-01-0.71407238E-04   3
 0.21205107E-07 0.59710684E-12-0.67289172E+05 0.36976978E+02                4
hxol4*o6o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16978621E+01 0.70926063E-01-0.29112853E-04 0.53037117E-08-0.35869840E-12   2
-0.61958410E+05 0.61208054E+02 0.22228823E+01 0.86972326E-01-0.62686500E-04   3
 0.17291423E-07 0.11642108E-11-0.66012578E+05 0.30488441E+02                4
hxol5*o2o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.72758780E+01 0.56251787E-01-0.21740532E-04 0.37976333E-08-0.24938011E-12   2
-0.67644531E+05 0.10327576E+02 0.22941432E+01 0.86125374E-01-0.59585254E-04   3
 0.15356791E-07 0.10898772E-11-0.68142320E+05 0.29601089E+02                4
hxol5*o3o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.72758780E+01 0.56251787E-01-0.21740532E-04 0.37976333E-08-0.24938011E-12   2
-0.67644531E+05 0.10327576E+02 0.22941432E+01 0.86125374E-01-0.59585254E-04   3
 0.15356791E-07 0.10898772E-11-0.68142320E+05 0.29601089E+02                4
hxol5*o4o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.42640331E+02 0.29981120E-02-0.23070737E-06 0.15417955E-10-0.75408019E-15   2
-0.81832516E+05-0.19035440E+03 0.36533856E+01 0.74593060E-01-0.35757683E-04   3
 0.17233370E-08 0.12074506E-11-0.67469336E+05 0.24255047E+02                4
hxol5*o6o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.57825603E+01 0.58104031E-01-0.22545919E-04 0.39472310E-08-0.25950474E-12   2
-0.64277824E+05 0.19283081E+02 0.32355437E+01 0.82910560E-01-0.58121932E-04   3
```

```
 0.16684162E-07 0.26118102E-12-0.65563773E+05 0.25482908E+02                4
hxol6*o3o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.57222195E+01 0.59059616E-01-0.23177750E-04 0.40916257E-08-0.27064481E-12    2
-0.63333973E+05 0.19622452E+02 0.25037837E+01 0.87005228E-01-0.61355058E-04    3
 0.15963574E-07 0.12442500E-11-0.64633543E+05 0.28661623E+02                4
hxol6*o4o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58526511E+01 0.58840603E-01-0.23070581E-04 0.40705661E-08-0.26917842E-12    2
-0.63385477E+05 0.18893845E+02 0.24600959E+01 0.87316446E-01-0.62128333E-04    3
 0.16766167E-07 0.94816451E-12-0.64628961E+05 0.28845613E+02                4
hxol6*o5o2h Therga3/19/9c   6h  12o   4     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.94713812E+01 0.53273901E-01-0.20361385E-04 0.35277099E-08-0.23026023E-12    2
-0.64202918E+05-0.25287628E+01 0.13574568E+01 0.89746810E-01-0.62132254E-04    3
 0.15178617E-07 0.14770242E-11-0.63656012E+05 0.33622314E+02                4
hxol2*o1j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.50445733E+01 0.48821330E-01-0.17896331E-04 0.30115004E-08-0.19262386E-12    2
-0.32700641E+05 0.13947197E+02 0.19057820E+01 0.72579697E-01-0.53381591E-04    3
 0.19433111E-07-0.17710369E-11-0.33402332E+05 0.24534199E+02                4
hxol3*o1j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19777069E+01 0.59442993E-01-0.22957585E-04 0.40072541E-08-0.26295706E-12    2
-0.30190818E+05 0.55989693E+02 0.50785387E+00 0.80474287E-01-0.69947622E-04    3
 0.32083033E-07-0.49041791E-11-0.33619379E+05 0.33085484E+02                4
hxol4*o1j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19841336E+01 0.59459966E-01-0.22975830E-04 0.40132058E-08-0.26354662E-12    2
-0.30187742E+05 0.56025478E+02 0.28849542E+00 0.81993192E-01-0.73592368E-04    3
 0.35720074E-07-0.61918587E-11-0.33595859E+05 0.34014881E+02                4
hxol3*o2j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.20810699E+01 0.60724188E-01-0.23789085E-04 0.41949111E-08-0.27729002E-12    2
-0.31482992E+05 0.53852333E+02-0.33087078E+00 0.85324995E-01-0.77389326E-04    3
 0.37864034E-07-0.67499673E-11-0.34789594E+05 0.34356827E+02                4
hxol4*o2j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.16368914E+01 0.58790170E-01-0.22627561E-04 0.39414978E-08-0.25833974E-12    2
-0.28303225E+05 0.54226696E+02-0.82242680E+00 0.89889355E-01-0.91197646E-04    3
 0.51783388E-07-0.11479981E-10-0.31526729E+05 0.38644547E+02                4
hxol5*o2j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10578621E+02 0.38725026E-01-0.12997522E-04 0.20579425E-08-0.12631829E-12    2
-0.33177453E+05-0.14539238E+02-0.33040497E+00 0.85191235E-01-0.82595943E-04    3
 0.47589328E-07-0.11616748E-10-0.31386820E+05 0.36846130E+02                4
hxol2*o3j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.53883033E+01 0.48171554E-01-0.17567883E-04 0.29453064E-08-0.18788882E-12    2
-0.33835414E+05 0.11811493E+02 0.82973999E+00 0.80270194E-01-0.70516973E-04    3
 0.35034716E-07-0.68964114E-11-0.34357121E+05 0.28657505E+02                4
hxol4*o3j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19850037E+01 0.60557593E-01-0.23698725E-04 0.41750310E-08-0.27574842E-12    2
-0.31520891E+05 0.53268429E+02-0.35995880E+00 0.85544512E-01-0.77948098E-04    3
 0.38449571E-07-0.69662856E-11-0.34786801E+05 0.34428566E+02                4
hxol5*o3j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10578621E+02 0.38725026E-01-0.12997522E-04 0.20579425E-08-0.12631829E-12    2
-0.33177453E+05-0.14539238E+02-0.33040497E+00 0.85191235E-01-0.82595943E-04    3
 0.47589328E-07-0.11616748E-10-0.31386820E+05 0.36846130E+02                4
hxol6*o3j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.91820374E+01 0.41142806E-01-0.14137502E-04 0.22759359E-08-0.14131352E-12    2
-0.28910223E+05-0.60640564E+01-0.15562859E+00 0.86313874E-01-0.84951876E-04    3
 0.48783885E-07-0.11671166E-10-0.27874318E+05 0.36054192E+02                4
hxol2*o4j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.57368855E+01 0.46470851E-01-0.16578173E-04 0.27349902E-08-0.17244042E-12    2
-0.30629812E+05 0.12747116E+02 0.36181900E+00 0.84659591E-01-0.83890111E-04    3
 0.48507442E-07-0.11464214E-10-0.31096562E+05 0.32909447E+02                4
hxol3*o4j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.20674188E+01 0.60699940E-01-0.23774905E-04 0.41915706E-08-0.27701677E-12    2
-0.31488453E+05 0.53748993E+02-0.39127961E+00 0.85745454E-01-0.78407975E-04    3
 0.38889086E-07-0.71160291E-11-0.34783125E+05 0.34585270E+02                4
```

```
hxol5*o4j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10425847E+02 0.40030450E-01-0.13728059E-04 0.22052391E-08-0.13662747E-12    2
-0.36453230E+05-0.16522301E+02 0.19120739E+00 0.80422789E-01-0.68312300E-04    3
 0.33212714E-07-0.67313178E-11-0.34652945E+05 0.32388714E+02                4
hxol6*o4j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.91820374E+01 0.41142806E-01-0.14137502E-04 0.22759359E-08-0.14131352E-12    2
-0.28910223E+05-0.60640564E+01-0.15562859E+00 0.86313874E-01-0.84951876E-04    3
 0.48783885E-07-0.11671166E-10-0.27874318E+05 0.36054192E+02                4
hxol2*o5j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.53412514E+01 0.47239114E-01-0.16981854E-04 0.28198166E-08-0.17875804E-12    2
-0.30525254E+05 0.14830078E+02 0.14828668E+01 0.76723717E-01-0.65973021E-04    3
 0.31950968E-07-0.59552537E-11-0.31206268E+05 0.28227583E+02                4
hxol3*o5j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.19533235E+01 0.59427585E-01-0.22955810E-04 0.40077301E-08-0.26303954E-12    2
-0.28233439E+05 0.55861027E+02 0.38304994E+00 0.81372783E-01-0.71896095E-04    3
 0.33852459E-07-0.54861319E-11-0.31645545E+05 0.33604404E+02                4
hxol4*o5j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.22876549E+01 0.61177045E-01-0.24026245E-04 0.42428212E-08-0.28067105E-12    2
-0.31458105E+05 0.55047642E+02 0.77228725E+00 0.77470168E-01-0.59651578E-04    3
 0.21498311E-07-0.13159725E-11-0.34896309E+05 0.29936848E+02                4
hxol6*o5j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.90402603E+01 0.42439528E-01-0.14870201E-04 0.24240001E-08-0.15165408E-12    2
-0.32195504E+05-0.78849792E+01 0.25891316E+00 0.82142696E-01-0.71959912E-04    3
 0.35623174E-07-0.72006520E-11-0.31125828E+05 0.32311958E+02                4
hxol3*o6j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13714999E+01 0.58966264E-01-0.22809572E-04 0.39861003E-08-0.26179834E-12    2
-0.27345809E+05 0.52440693E+02-0.58600754E+00 0.87279253E-01-0.82269376E-04    3
 0.42077929E-07-0.80386383E-11-0.30435449E+05 0.37678551E+02                4
hxol4*o6j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.13840135E+01 0.58993638E-01-0.22833681E-04 0.39933923E-08-0.26249472E-12    2
-0.27340891E+05 0.52508781E+02-0.41005436E+00 0.86067677E-01-0.79383295E-04    3
 0.39222964E-07-0.70374782E-11-0.30454395E+05 0.36932228E+02                4
hxol5*o6j Thergas03/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10664260E+02 0.40187787E-01-0.13878300E-04 0.22410811E-08-0.13939293E-12    2
-0.33591898E+05-0.17303047E+02-0.36595225E-01 0.79766326E-01-0.63009400E-04    3
 0.26657785E-07-0.43205686E-11-0.31571219E+05 0.34509243E+02                4
c5h10cooh-1 Therga3/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.18704327E+01 0.61482392E-01-0.24357241E-04 0.43283475E-08-0.28763572E-12    2
-0.40630375E+05 0.49167492E+02-0.19013747E+01 0.92675835E-01-0.86137021E-04    3
 0.42117762E-07-0.75157302E-11-0.43604629E+05 0.38288235E+02                4
c5h10cooh-2 Therga3/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14848416E+01 0.59633460E-01-0.23228640E-04 0.40801069E-08-0.26898376E-12    2
-0.37425379E+05 0.49901493E+02-0.21200294E+01 0.95336512E-01-0.95348536E-04    3
 0.51426269E-07-0.10606462E-10-0.40370797E+05 0.41448421E+02                4
c5h10cooh-3 Therga3/20/9c   6h  11o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.14848416E+01 0.59633460E-01-0.23228640E-04 0.40801069E-08-0.26898376E-12    2
-0.37425379E+05 0.49901493E+02-0.21200294E+01 0.95336512E-01-0.95348536E-04    3
 0.51426269E-07-0.10606462E-10-0.40370797E+05 0.41448421E+02                4
ch2cooh  Thergas 03/20/9c   2h  3o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.93029661E+01 0.69815558E-02-0.17180930E-05 0.21747887E-09-0.11452205E-13    2
-0.32848316E+05-0.23130653E+02 0.12598374E+00 0.34687348E-01-0.34489818E-04    3
 0.18876753E-07-0.44256933E-11-0.30382291E+05 0.23825567E+02                4
ch2ch2cooh Thergas3/20/9c   3h  5o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.63459964E+01 0.40684473E-01-0.16808332E-04 0.30763088E-08-0.20875162E-12    2
-0.26339281E+05 0.69442528E+02-0.12847569E+01 0.57524763E-01-0.66488785E-04    3
 0.38840408E-07-0.82382261E-11-0.30595645E+05 0.32566666E+02                4
c2h3cooh Thergas 03/20/9c   3h  4o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.88741312E+01 0.13897711E-01-0.48470301E-05 0.78724954E-09-0.49112956E-13    2
-0.44327402E+05-0.18188774E+02 0.69044226E+00 0.35548516E-01-0.23280432E-04    3
 0.54139253E-08 0.28110224E-12-0.42047363E+05 0.24283270E+02                4
hoch2coch2 Thergas3/20/9c   3h  5o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.11595228E+02 0.11442376E-01-0.29792718E-05 0.39280218E-09-0.21252143E-13    2
-0.25335428E+05-0.30319328E+02 0.18608906E+01 0.38478706E-01-0.33612501E-04    3
 0.18263671E-07-0.45594973E-11-0.22468248E+05 0.20380983E+02                4
c2h3coch2oh 3/20/9 THERMc   4h  6o   2     0G   300.000  5000.000 1385.000    31
 1.40328795E+01 1.58209258E-02-5.48990637E-06 8.60512472E-10-5.02558470E-14    2
-3.91158914E+04-4.40020336E+01 2.61108215E+00 4.18221558E-02-2.89144990E-05    3
 1.09087376E-08-1.77647198E-12-3.49743351E+04 1.77615725E+01                4
c2h3cochoh 3/20/ 9 THERMc   4 h  5o   2     0G   300.000  5000.000 1393.000    31
 1.54607858E+01 1.21312833E-02-4.23389175E-06 6.66277896E-10-3.90223202E-14    2
-2.42188599E+04-5.32856035E+01 4.19270119E+01 5.36489893E-02-4.97438432E-05    3
 2.37170402E-08-4.49807903E-12-1.95632118E+04 2.53522502E+01                4
c3h7coc2h3 3/20/ 9 THERMc   6h  10o   1     0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.87183592E+01 2.41363189E-02-8.35497476E-06 1.30748276E-09-7.62747475E-14    2
-2.96755853E+04-6.95728617E+01 3.14273123E-01 6.70372965E-02-4.78379133E-05    3
 1.84750498E-08-3.03547113E-12-2.31437069E+04 2.95218946E+01                4
c3h6coc2h3-1 3/20/9THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1387.000    41
 1.83671859E+01 2.19412344E-02-7.61003403E-06 1.19249056E-09-6.96315700E-14    2
-4.64669117E+03-6.52844977E+01 1.04122160E+00 6.25599467E-02-4.52533206E-05    3
 1.76786489E-08-2.92967277E-12 1.47753875E+03 2.79204454E+01                4
c3h6coc2h3-2 3/20/9THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1376.000    41
 1.85383420E+01 2.09644783E-02-7.10726936E-06 1.09812027E-09-6.35356671E-14    2
-6.09649496E+03-6.53208710E+01 1.39542268E+00 5.77571211E-02-3.62039487E-05    3
 1.11354497E-08-1.33077569E-12 1.83960497E+02 2.79077319E+01                4
c3h6coc2h3-3 3/20/9THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1391.000    31
 1.95088401E+01 2.13070828E-02-7.37138985E-06 1.15315577E-09-6.72565403E-14    2
-8.33408595E+03-7.35609380E+01 1.83838755E-01 7.01355834E-02-5.64562252E-05    3
 2.42899749E-08-4.31253176E-12-1.88889898E+03 2.90917145E+01                4
c2h5coc3h5-1 3/20/9THERMc   6h  10o   1     0G   300.000  5000.000 1388.000    41
 1.81829678E+01 2.45052211E-02-8.46335590E-06 1.32244485E-09-7.70671491E-14    2
-2.70818973E+04-6.52675672E+01-3.75897473E-01 6.77164773E-02-4.80841893E-05    3
 1.84447669E-08-3.00647177E-12-2.04998688E+04 3.46619611E+01                4
c2h5coc3h4 3/20/ 9 THERMc   6h   9o   1     0G   300.000  5000.000 1392.000    21
 1.79430404E+01 2.28618321E-02-7.86481218E-06 1.22581504E-09-7.13141958E-14    2
-1.49045027E+04-6.55197165E+01-2.30236091E+00 7.25240997E-02-5.57224466E-05    3
 2.27185315E-08-3.83294799E-12-8.05156651E+03 4.24699030E+01                4
ch3coc4h7-1 Therga3/20/9c   6h  10o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.84927855E+01 0.38035810E-01-0.14130595E-04 0.24004279E-08-0.15456161E-12    2
-0.23128041E+05-0.10855644E+02 0.62356597E+00 0.62436055E-01-0.37653906E-04    3
 0.88312362E-08 0.37648882E-12-0.21331750E+05 0.28588043E+02                4
Cc6e5oB  Thergas 03/20/9c   6h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10839655E+02 0.31051598E-01-0.10387728E-04 0.16399105E-08-0.10040495E-12    2
-0.34383672E+04-0.23849907E+02 0.16176395E-01 0.69443278E-01-0.60679849E-04    3
 0.31208131E-07-0.69517846E-11-0.10684680E+04 0.29527189E+02                4
Dc6e5oB  Thergas 03/20/9c   6h   9o   1     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10058054E+02 0.31860441E-01-0.10697982E-04 0.16927335E-08-0.10376895E-12    2
-0.76155527E+04-0.18963280E+02 0.12635521E+01 0.58932316E-01-0.38616679E-04    3
 0.12397782E-07-0.11804337E-11-0.55116826E+04 0.25375278E+02                4
b1ol2*o4j Thergas 3/20/9c   4h  7o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26380894E+01 0.33672862E-01-0.12144186E-04 0.20208077E-08-0.12827821E-12    2
-0.22919156E+05 0.24946110E+02 0.10970583E+01 0.57884518E-01-0.59984595E-04    3
 0.35182467E-07-0.81331513E-11-0.24226590E+05 0.26247059E+02                4
b1ol3*o4j Thergas 3/20/9c   4h  7o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.74330559E+01 0.27007179E-01-0.91615320E-05 0.14603160E-08-0.89986470E-13    2
-0.26897330E+05-0.40765686E+01 0.48209801E+00 0.55450484E-01-0.47666712E-04    3
 0.22679252E-07-0.43068773E-11-0.25794322E+05 0.28729477E+02                4
pe1ol3*o5j Thergas3/20/9c   5h   9o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.28177528E+01 0.52117407E-01-0.20350391E-04 0.35809427E-08-0.23638930E-12    2
-0.24068164E+05 0.58099331E+02-0.36145309E+00 0.75402156E-01-0.75363052E-04    3
 0.40943323E-07-0.83663822E-11-0.27543881E+05 0.34931767E+02                4
pe1ol4*o5j Thergas3/20/9c   5h   9o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.90158472E+01 0.33651017E-01-0.11545627E-04 0.18558295E-08-0.11506064E-12    2
```

```
-0.30231275E+05-0.10505356E+02 0.24833661E+00 0.67425027E-01-0.54883396E-04    3
 0.24201032E-07-0.41436689E-11-0.28685428E+05 0.31512085E+02                4
pe1*o5ol Thergas 03/20/9c   5h  10o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.48570399E+01 0.43349925E-01-0.16637965E-04 0.28922988E-08-0.18929349E-12    2
-0.48467461E+05 0.12647751E+02 0.13343251E+01 0.61682262E-01-0.38324994E-04    3
 0.84332852E-08 0.11058172E-11-0.48526176E+05 0.27322203E+02                4
pe1j*o5ol Thergas 3/20/9c   5h   9o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.70850487E+01 0.35299279E-01-0.12112658E-04 0.19464539E-08-0.12061989E-12    2
-0.31231434E+05 0.24903488E+01 0.16247107E+01 0.60699347E-01-0.46701171E-04    3
 0.19525379E-07-0.30622833E-11-0.30748021E+05 0.26978991E+02                4
pe1ol3*o4e Thergas3/20/9c   5h   8o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30589117E+02-0.44905175E-02 0.53424619E-05-0.13882864E-08 0.11514799E-12    2
-0.46435027E+05-0.13154630E+03 0.38101373E+01 0.42214815E-01-0.14987122E-04    3
-0.10940863E-08 0.38778068E-12-0.36360262E+05 0.16729578E+02                4
pe1ol3*o4e2j 3/20/9THERMc   5h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000    41
 1.85185590E+01 1.67847056E-02-5.84663771E-06 9.18856573E-10-5.37649177E-14    2
-2.30549435E+04-6.64450966E+01 9.82120356E-01 6.25670488E-02-4.35096399E-05    3
 2.41079161E-08-4.41716727E-12-1.73521169E+04 2.61876951E+01                4
pe1j3ol3*o4e 3/20/9 THERMc   5h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1389.000    41
 1.72019051E+01 1.77570506E-02-6.14777025E-06 9.62132331E-10-5.61288190E-14    2
-2.26754315E+04-5.77220353E+01 2.44768901E+00 5.55589980E-02-4.52814384E-05    3
 2.01266097E-08-3.71218788E-12-1.77440592E+04 2.05713364E+01                4
c2h3coch2hco 3/20/9THERMc   5h   6o   2    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.68769642E+01 1.61913284E-02-5.67379322E-06 8.95337958E-10-5.25401315E-14    2
-3.47616195E+04-5.83230757E+01 6.87543627E-02 5.60251296E-02-4.23175060E-05    3
 1.65049826E-08-2.64604084E-12-2.89522325E+04 3.17961457E+01                4
c2h3coch2co 3/20/9 THERMc   5h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    31
 1.64836434E+01 1.40142410E-02-4.93114637E-06 7.80298041E-10-4.58778183E-14    2
-1.58061802E+04-5.45415411E+01 8.15192809E-01 5.13180232E-02-3.93553532E-05    3
 1.54604269E-08-2.48263477E-12-1.04190407E+04 2.93875755E+01                4
c2h3cohco  3/20/ 9 THERMc   4h   4o   2    0G   300.000  5000.000 1385.000    21
 1.43267687E+01 1.11375907E-02-3.93010308E-06 6.23089893E-10-3.66842168E-14    2
-2.85387223E+04-4.71741680E+01 1.24245677E+00 4.21681144E-02-3.23559692E-05    3
 1.26200873E-08-2.00398462E-12-2.40361565E+04 2.29423532E+01                4
c2h3coco   3/20/ 9 THERMc   4h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000    21
 1.37903577E+01 8.97825351E-03-3.16926957E-06 5.02571817E-10-2.95927355E-14    2
-1.24019447E+04-4.35131404E+01 2.45455231E+00 3.75185736E-02-3.14284407E-05    3
 1.35165580E-08-2.35619537E-12-8.64960319E+03 1.66745856E+01                4
c6oAoD                   c   6h  10o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899969E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060305E+05 0.26899633E+02                4
c6oyAoD                  c   6h   9o   2     G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.93244343E+01 0.67222312E-01-0.27887543E-04 0.51179700E-08-0.34791446E-12    2
-0.22908547E+05 0.95663322E+02 0.18367063E+01 0.68703756E-01-0.57223951E-04    3
 0.23976128E-07-0.26011268E-11-0.29295502E+05 0.26028908E+02                4
VINacrol   3/ 8/ 7 THERMc   5h   6o   1    0G   300.000  5000.000 1390.000    21
 1.96694186E+01 9.47268019E-03-3.43345392E-06 5.54119499E-10-3.30290903E-14    2
-1.21198582E+04-7.96616315E+01-1.49467174E+00 6.32157577E-02-5.57679330E-05    3
 2.37098997E-08-3.94697393E-12-5.31850599E+03 3.22824837E+01                4
P2c4h614                 c   7h  13o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.19672320E+02 0.27687470E-01-0.79897730E-05 0.11365280E-08-0.64848860E-13    2
 0.60075160E+04-0.73268260E+02-0.35493880E+01 0.93466240E-01-0.78503050E-04    3
 0.36474530E-07-0.74456470E-11 0.12485930E+05 0.46685370E+02                4
P2c4h513                 c   7h  12o   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.17810300E+02 0.29455120E-01-0.96432360E-05 0.14973100E-08-0.90522930E-13    2
-0.41163220E+04-0.66349990E+02-0.21090900E+01 0.81644630E-01-0.53366480E-04    3
 0.11908060E-07 0.93417400E-12 0.14750950E+04 0.37193940E+02                4
ch2ch2ch2hco 3/19/7THERMc   4h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1379.000    31
 1.30322954E+01 1.62418373E-02-5.54388124E-06 8.59723685E-10-4.98459726E-14    2
-6.45915975E+03-3.85453878E+01 2.67672303E+00 3.73064128E-02-2.11281405E-05    3
```

```
 5.80472681E-09-6.09688236E-13-2.49714183E+03 1.82696076E+01                 4
Ac5oB      7/11/ 7 THERMc   5h   9o   1    0G   300.000  5000.000 1388.000    31
 1.69313136E+01 2.07518568E-02-7.13681085E-06 1.11208678E-09-6.46860138E-14    2
-1.79816527E+04-5.98448615E+01 1.19201012E+00 5.69526100E-02-3.95451315E-05    3
 1.46451683E-08-2.28996216E-12-1.23840665E+04 2.50122634E+01                 4
etvinket         c   5h   8o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000    21
 0.28373096E+02-0.42534666E-02 0.51976122E-05-0.13628563E-08 0.11350900E-12    2
-0.27606387E+05-0.12429077E+03 0.26887226E+01 0.40447008E-01-0.14406912E-04    3
-0.76786449E-09 0.26892808E-12-0.17917240E+05 0.17995195E+02                 4
c2h3coc2h4 3/19/ 7 THERMc   5h   7o   1    0G   300.000  5000.000 1386.000    31
 1.51607797E+01 1.74597490E-02-6.06668423E-06 9.51792018E-10-5.56230162E-14    2
-5.25093416E+02-4.94554651E+01 1.26715080E+00 5.04051808E-02-3.71925903E-05    3
 1.49232602E-08-2.54196869E-12 4.36559254E+03 2.51816237E+01                 4
nc12h26            c  12h  26o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32954853E+02 0.60561012E-01-0.19354413E-04 0.29570053E-08-0.17694127E-12    2
-0.51153316E+05-0.13856094E+03-0.18607714E+01 0.14028591E+00-0.76466909E-04    3
 0.13218920E-07 0.17346834E-11-0.40110445E+05 0.46869667E+02                 4
c12h25qA  7/9/9    THERGc  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.36640556E+02 0.61769653E-01-0.19591676E-04 0.29751546E-08-0.17717841E-12    2
-0.62259102E+05-0.14860239E+03-0.14563072E+00 0.15059604E+00-0.88889065E-04    3
 0.19245219E-07 0.78135805E-12-0.51046199E+05 0.45666924E+02                 4
c12h25qB         Thergas c  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62373287E+02 0.23531077E-01-0.46572327E-05 0.50369547E-09-0.24014921E-13    2
-0.75530203E+05-0.29490631E+03 0.18681370E+01 0.14028056E+00-0.68844362E-04    3
 0.62777490E-08 0.21379660E-11-0.53879988E+05 0.35927357E+02                 4
c12h25qC         Thergas c  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62377533E+02 0.23521373E-01-0.46503283E-05 0.50180377E-09-0.23841452E-13    2
-0.75259844E+05-0.29492920E+03 0.19473383E+01 0.13974491E+00-0.67591820E-04    3
 0.50593325E-08 0.25591905E-11-0.53616910E+05 0.35590057E+02                 4
c12h25qD         Thergas c  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62377533E+02 0.23521373E-01-0.46503283E-05 0.50180377E-09-0.23841452E-13    2
-0.75259844E+05-0.29492920E+03 0.19473383E+01 0.13974491E+00-0.67591820E-04    3
 0.50593325E-08 0.25591905E-11-0.53616910E+05 0.35590057E+02                 4
c12h25qE         Thergas c  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62377533E+02 0.23521373E-01-0.46503283E-05 0.50180377E-09-0.23841452E-13    2
-0.75259844E+05-0.29492920E+03 0.19473383E+01 0.13974491E+00-0.67591820E-04    3
 0.50593325E-08 0.25591905E-11-0.53616910E+05 0.35590057E+02                 4
c12h25qF         Thergas c  12h  26o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62344296E+02 0.21242894E-01-0.38102285E-05 0.37674580E-09-0.16618624E-13    2
-0.57533883E+05-0.29643222E+03 0.76379037E+00 0.14260226E+00-0.75811615E-04    3
 0.12171522E-07 0.40244929E-12-0.35665105E+05 0.39555809E+02                 4
c12h25qjA        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.37618370E+02 0.57374664E-01-0.17392913E-04 0.25629325E-08-0.14979856E-12    2
-0.44871855E+05-0.15556454E+03-0.87292582E+00 0.15030643E+00-0.89592431E-04    3
 0.18894987E-07 0.12527560E-11-0.33143465E+05 0.47697250E+02                 4
c12h25qjB        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62286880E+02 0.21346157E-01-0.38715211E-05 0.39138803E-09-0.17832378E-13    2
-0.57783125E+05-0.29611136E+03 0.94223028E+00 0.14136936E+00-0.72860734E-04    3
 0.92360981E-08 0.14380296E-11-0.35956016E+05 0.38801697E+02                 4
c12h25qjC        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62344296E+02 0.21242894E-01-0.38102285E-05 0.37674580E-09-0.16618624E-13    2
-0.57533738E+05-0.29643091E+03 0.68903309E+00 0.14311776E+00-0.77041921E-04    3
 0.13391952E-07-0.27007315E-13-0.35657066E+05 0.39873726E+02                 4
c12h25qjD        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62344296E+02 0.21242894E-01-0.38102285E-05 0.37674580E-09-0.16618624E-13    2
-0.57533691E+05-0.29643134E+03 0.65889615E+00 0.14332245E+00-0.77524302E-04    3
 0.13865460E-07-0.19220610E-12-0.35653773E+05 0.40001446E+02                 4
c12h25qjE        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62344296E+02 0.21242894E-01-0.38102285E-05 0.37674580E-09-0.16618624E-13    2
-0.57533883E+05-0.29643213E+03 0.76379037E+00 0.14260226E+00-0.75811615E-04    3
 0.12171522E-07 0.40244929E-12-0.35665105E+05 0.39555920E+02                 4
c12h25qjF        Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62344296E+02 0.21242894E-01-0.38102285E-05 0.37674580E-09-0.16618624E-13    2
-0.57533883E+05-0.29643222E+03 0.76379037E+00 0.14260226E+00-0.75811615E-04    3
 0.12171522E-07 0.40244929E-12-0.35665105E+05 0.39555809E+02                 4
Ac12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35019264E+02 0.53984217E-01-0.16127555E-04 0.23493905E-08-0.13611887E-12    2
-0.27002844E+05-0.14688135E+03-0.26787131E+01 0.14895955E+00-0.10370397E-03    3
 0.39153829E-07-0.66526311E-11-0.15498206E+05 0.51700935E+02                 4
Bc12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34313728E+02 0.54669626E-01-0.16408065E-04 0.24031634E-08-0.14001757E-12    2
-0.27840984E+05-0.14277184E+03-0.20441115E+01 0.14537129E+00-0.98893834E-04    3
 0.36474685E-07-0.60605119E-11-0.16672502E+05 0.49043385E+02                 4
Cc12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34687397E+02 0.53965740E-01-0.16055870E-04 0.23308029E-08-0.13465285E-12    2
-0.27941668E+05-0.14474600E+03-0.30809829E+01 0.15270582E+00-0.11532533E-03    3
 0.51511542E-07-0.11020447E-10-0.16571533E+05 0.53371246E+02                 4
Dc12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34687397E+02 0.53965740E-01-0.16055870E-04 0.23308029E-08-0.13465285E-12    2
-0.27941668E+05-0.14474600E+03-0.30809829E+01 0.15270582E+00-0.11532533E-03    3
 0.51511542E-07-0.11020447E-10-0.16571533E+05 0.53371246E+02                 4
Ec12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34687397E+02 0.53965740E-01-0.16055870E-04 0.23308029E-08-0.13465285E-12    2
-0.27941668E+05-0.14474600E+03-0.30809829E+01 0.15270582E+00-0.11532533E-03    3
 0.51511542E-07-0.11020447E-10-0.16571533E+05 0.53371246E+02                 4
Fc12h25          Thergas c  12h  25o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34687397E+02 0.53965740E-01-0.16055870E-04 0.23308029E-08-0.13465285E-12    2
-0.27941668E+05-0.14474600E+03-0.30809829E+01 0.15270582E+00-0.11532533E-03    3
 0.51511542E-07-0.11020447E-10-0.16571533E+05 0.53371246E+02                 4
c12h24-1         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32234798E+02 0.56552570E-01-0.18093835E-04 0.27684532E-08-0.16592406E-12    2
-0.35563773E+05-0.13349651E+03-0.15633383E+01 0.13424896E+00-0.73975803E-04    3
 0.12821724E-07 0.17380263E-11-0.24880615E+05 0.46390282E+02                 4
c12h24-2         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31256207E+02 0.57557959E-01-0.18471505E-04 0.28313984E-08-0.16985994E-12    2
-0.36252531E+05-0.12871223E+03-0.20470607E+01 0.13325544E+00-0.73103089E-04    3
 0.13984048E-07 0.88948114E-12-0.25587510E+05 0.48974506E+02                 4
c12h24-3         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31176893E+02 0.57774976E-01-0.18586501E-04 0.28551115E-08-0.17159508E-12    2
-0.36264719E+05-0.12843930E+03-0.32896221E+01 0.13788706E+00-0.78192003E-04    3
 0.15800705E-07 0.81891064E-12-0.25420246E+05 0.54774788E+02                 4
c12h24-4         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31232893E+02 0.57674546E-01-0.18527035E-04 0.28409342E-08-0.17042218E-12    2
-0.36287098E+05-0.12875117E+03-0.32533827E+01 0.13762254E+00-0.77525307E-04    3
 0.15106306E-07 0.10738911E-11-0.25423932E+05 0.54623177E+02                 4
c12h24-5         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31232893E+02 0.57674546E-01-0.18527035E-04 0.28409342E-08-0.17042218E-12    2
-0.36287098E+05-0.12875117E+03-0.32533827E+01 0.13762254E+00-0.77525307E-04    3
 0.15106306E-07 0.10738911E-11-0.25423932E+05 0.54623177E+02                 4
c12h24-6         Thergas c  12h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31232893E+02 0.57674546E-01-0.18527035E-04 0.28409342E-08-0.17042218E-12    2
-0.36287098E+05-0.12944424E+03-0.32533827E+01 0.13762254E+00-0.77525307E-04    3
 0.15106306E-07 0.10738911E-11-0.25423932E+05 0.53930111E+02                 4
Cc12h23-1        Thergas c  12h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.33288307E+02 0.51555220E-01-0.15500202E-04 0.22630058E-08-0.13102625E-12    2
-0.19895801E+05-0.13887286E+03-0.75922024E+00 0.12965782E+00-0.72400282E-04    3
 0.13907604E-07 0.10443464E-11-0.90791035E+04 0.42491196E+02                 4
Dc12h23-2        Thergas c  12h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32850796E+02 0.51909804E-01-0.15651567E-04 0.22952356E-08-0.13359129E-12    2
-0.21669414E+05-0.13709052E+03 0.86993342E-02 0.12702815E+00-0.73278970E-04    3
 0.19078014E-07-0.15762386E-11-0.11084525E+05 0.38236412E+02                 4
Ec12h23-3        Thergas c  12h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32859043E+02 0.51969685E-01-0.15673513E-04 0.22970568E-08-0.13354419E-12    2
-0.21716146E+05-0.13736414E+03-0.10455484E+01 0.13039055E+00-0.75357682E-04    3
 0.17907661E-07-0.59213767E-12-0.10938199E+05 0.43172840E+02                 4
Fc12h23-4        Thergas c  12h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32939491E+02 0.51829435E-01-0.15592554E-04 0.22781517E-08-0.13200550E-12    2
-0.21748266E+05-0.13784363E+03-0.13577309E+01 0.13258462E+00-0.80679405E-04    3
 0.23258883E-07-0.24965644E-11-0.10905291E+05 0.44459000E+02                 4
Gc12h23-5        Thergas c  12h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.32941418E+02 0.51825851E-01-0.15590365E-04 0.22776174E-08-0.13196055E-12    2
-0.21749547E+05-0.13785844E+03-0.97598118E+00 0.12993172E+00-0.74289826E-04    3
 0.16865481E-07-0.22927903E-12-0.10946097E+05 0.42840221E+02                 4
c12h25ojA        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34465565E+02 0.58408115E-01-0.17912187E-04 0.26593143E-08-0.15612479E-12    2
-0.43698938E+05-0.14177788E+03-0.27885599E+01 0.14976911E+00-0.93919378E-04    3
 0.26195741E-07-0.18106812E-11-0.32342775E+05 0.54775272E+02                 4
c12h25ojB        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59351635E+02 0.21913534E-01-0.40893274E-05 0.42543835E-09-0.19908601E-13    2
-0.55623754E+05-0.28349225E+03-0.93708974E+00 0.14058565E+00-0.76609525E-04    3
 0.15972557E-07-0.14295972E-11-0.34102527E+05 0.45725567E+02                 4
c12h25ojC        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59351635E+02 0.21913534E-01-0.40893274E-05 0.42543835E-09-0.19908601E-13    2
-0.55351719E+05-0.28349304E+03-0.11163752E+01 0.14183038E+00-0.79601472E-04    3
 0.18959616E-07-0.24866350E-11-0.33811617E+05 0.46482998E+02                 4
c12h25ojD        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59351635E+02 0.21913534E-01-0.40893274E-05 0.42543835E-09-0.19908601E-13    2
-0.55351668E+05-0.28349356E+03-0.11465120E+01 0.14203508E+00-0.80083839E-04    3
 0.19433122E-07-0.26518332E-11-0.33808324E+05 0.46610634E+02                 4
c12h25ojE        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59351635E+02 0.21913534E-01-0.40893274E-05 0.42543835E-09-0.19908601E-13    2
-0.55351859E+05-0.28349438E+03-0.10416178E+01 0.14131489E+00-0.78371158E-04    3
 0.17739183E-07-0.20571773E-11-0.33819656E+05 0.46165066E+02                 4
c12h25ojF        Thergas c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59351635E+02 0.21913534E-01-0.40893274E-05 0.42543835E-09-0.19908601E-13    2
-0.55351859E+05-0.28349451E+03-0.10416178E+01 0.14131489E+00-0.78371158E-04    3
 0.17739183E-07-0.20571773E-11-0.33819656E+05 0.46164951E+02                 4
c10h21hco        Thergas c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.13877097E+02 0.80823220E-01-0.30015182E-04 0.50976761E-08-0.32819841E-12    2
-0.50393602E+05-0.28585449E+02-0.48171708E+00 0.12802774E+00-0.74733660E-04    3
 0.13724462E-07 0.28457690E-11-0.47522375E+05 0.42087368E+02                 4
c12h24rAqB       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62916485E+02 0.20088561E-01-0.34230768E-05 0.31850356E-09-0.13085896E-13    2
-0.51212652E+05-0.29567828E+03 0.66345030E+00 0.15163812E+00-0.10253148E-03    3
 0.38652544E-07-0.85287003E-11-0.29578648E+05 0.41706005E+02                 4
c12h24rAqC       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62890060E+02 0.20137407E-01-0.34527884E-05 0.32573191E-09-0.13693276E-13    2
-0.50578676E+05-0.29553265E+03 0.81745768E+00 0.15056252E+00-0.99932549E-04    3
 0.36046366E-07-0.76029833E-11-0.28971008E+05 0.41054890E+02                 4
c12h24rAqD       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62890060E+02 0.20137407E-01-0.34527884E-05 0.32573191E-09-0.13693276E-13    2
-0.50578676E+05-0.29553265E+03 0.81745768E+00 0.15056252E+00-0.99932549E-04    3
 0.36046366E-07-0.76029833E-11-0.28971008E+05 0.41054890E+02                 4
c12h24rAqE       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62890060E+02 0.20137407E-01-0.34527884E-05 0.32573191E-09-0.13693276E-13    2
-0.50578676E+05-0.29553265E+03 0.81745768E+00 0.15056252E+00-0.99932549E-04    3
 0.36046366E-07-0.76029833E-11-0.28971008E+05 0.41054890E+02                 4
c12h24rAqF       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62890060E+02 0.20137407E-01-0.34527884E-05 0.32573191E-09-0.13693276E-13    2
-0.50578676E+05-0.29553265E+03 0.81745768E+00 0.15056252E+00-0.99932549E-04    3
 0.36046366E-07-0.76029833E-11-0.28971008E+05 0.41054890E+02                 4
c12h24rBqA       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38315292E+02 0.55287708E-01-0.16364847E-04 0.23657210E-08-0.13621412E-12    2
-0.39026352E+05-0.15516116E+03-0.13640966E+01 0.16302051E+00-0.12779688E-03    3
 0.57620898E-07-0.12013351E-10-0.27507719E+05 0.51468464E+02                 4
c12h24rBqC       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62314606E+02 0.20576498E-01-0.35837452E-05 0.34582726E-09-0.14973655E-13    2
-0.51466547E+05-0.29214197E+03 0.19509536E+01 0.14349614E+00-0.86726432E-04    3
 0.24950957E-07-0.40216688E-11-0.30198432E+05 0.36287064E+02                 4
c12h24rBqD       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62314606E+02 0.20576498E-01-0.35837452E-05 0.34582726E-09-0.14973655E-13    2
-0.51466547E+05-0.29214197E+03 0.19509536E+01 0.14349614E+00-0.86726432E-04    3
 0.24950957E-07-0.40216688E-11-0.30198432E+05 0.36287064E+02                 4
c12h24rBqE       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62314606E+02 0.20576498E-01-0.35837452E-05 0.34582726E-09-0.14973655E-13    2
-0.51466547E+05-0.29214197E+03 0.19509536E+01 0.14349614E+00-0.86726432E-04    3
 0.24950957E-07-0.40216688E-11-0.30198432E+05 0.36287064E+02                 4
c12h24rBqF       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62314606E+02 0.20576498E-01-0.35837452E-05 0.34582726E-09-0.14973655E-13    2
-0.51466547E+05-0.29214197E+03 0.19509536E+01 0.14349614E+00-0.86726432E-04    3
 0.24950957E-07-0.40216688E-11-0.30198432E+05 0.36287064E+02                 4
c12h24rCqA       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38315292E+02 0.55287708E-01-0.16364847E-04 0.23657210E-08-0.13621412E-12    2
-0.39026352E+05-0.15516116E+03-0.13640966E+01 0.16302051E+00-0.12779688E-03    3
 0.57620898E-07-0.12013351E-10-0.27507719E+05 0.51468464E+02                 4
c12h24rCqB       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62374512E+02 0.20455020E-01-0.35814087E-05 0.35301234E-09-0.15851962E-13    2
-0.51718203E+05-0.29238055E+03 0.76827383E+00 0.15187250E+00-0.10573165E-03    3
 0.42620044E-07-0.99324776E-11-0.30354051E+05 0.41228085E+02                 4
c12h24rCqD       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rCqE       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rCqF       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rDqA       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38315292E+02 0.55287708E-01-0.16364847E-04 0.23657210E-08-0.13621412E-12    2
-0.39026352E+05-0.15516116E+03-0.13640966E+01 0.16302051E+00-0.12779688E-03    3
 0.57620898E-07-0.12013351E-10-0.27507719E+05 0.51468464E+02                 4
c12h24rDqB       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62374512E+02 0.20455020E-01-0.35814087E-05 0.35301234E-09-0.15851962E-13    2
-0.51718203E+05-0.29238055E+03 0.76827383E+00 0.15187250E+00-0.10573165E-03    3
 0.42620044E-07-0.99324776E-11-0.30354051E+05 0.41228085E+02                 4
c12h24rDqC       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rDqE       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rDqF       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                 4
c12h24rEqA       Thergas c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.38315292E+02 0.55287708E-01-0.16364847E-04 0.23657210E-08-0.13621412E-12    2
-0.39026352E+05-0.15516116E+03-0.13640966E+01 0.16302051E+00-0.12779688E-03    3
```

```
 0.57620898E-07-0.12013351E-10-0.27507719E+05 0.51468464E+02                4
c12h24rEqB     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62374512E+02 0.20455020E-01-0.35814087E-05 0.35301234E-09-0.15851962E-13   2
-0.51718203E+05-0.29238055E+03 0.76827383E+00 0.15187250E+00-0.10573165E-03   3
 0.42620044E-07-0.99324776E-11-0.30354051E+05 0.41228085E+02                4
c12h24rEqC     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rEqD     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rEqF     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rFqA     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.38315292E+02 0.55287708E-01-0.16364847E-04 0.23657210E-08-0.13621412E-12   2
-0.39026352E+05-0.15516116E+03-0.13640966E+01 0.16302051E+00-0.12779688E-03   3
 0.57620898E-07-0.12013351E-10-0.27507719E+05 0.51468464E+02                4
c12h24rFqB     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62374512E+02 0.20455020E-01-0.35814087E-05 0.35301234E-09-0.15851962E-13   2
-0.51718203E+05-0.29238055E+03 0.76827383E+00 0.15187250E+00-0.10573165E-03   3
 0.42620044E-07-0.99324776E-11-0.30354051E+05 0.41228085E+02                4
c12h24rFqC     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rFqD     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rFqE     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rGqC     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rGqD     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rGqE     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rGqF     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rHqD     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rHqE     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rHqF     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rIqE     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rIqF     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24rJqF     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13   2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03   3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h24qjBqA    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.66095581E+02 0.22338912E-01-0.39865527E-05 0.38240358E-09-0.15922037E-13   2
-0.68666344E+05-0.30753156E+03 0.24959502E+01 0.15278600E+00-0.87909459E-04   3
 0.17855365E-07-0.42405920E-12-0.46602566E+05 0.37591225E+02                4
c12h24qjCqA    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30631427E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.36161407E+02                4
c12h24qjDqA    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30631442E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.36161278E+02                4
c12h24qjEqA    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30631445E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.36161221E+02                4
c12h24qjFqA    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30700754E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.35468155E+02                4
c12h24qjAqB    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.66095581E+02 0.22338912E-01-0.39865527E-05 0.38240358E-09-0.15922037E-13   2
-0.68666344E+05-0.30822443E+03 0.24959502E+01 0.15278600E+00-0.87909459E-04   3
 0.17855365E-07-0.42405920E-12-0.46602566E+05 0.36898357E+02                4
c12h24qjCqB    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548812E+05-0.40188138E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49422457E+05 0.28401377E+02                4
c12h24qjDqB    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548766E+05-0.40188138E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49419164E+05 0.28529505E+02                4
c12h24qjEqB    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548766E+05-0.40188141E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49419164E+05 0.28529449E+02                4
c12h24qjFqB    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257440E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708355E+02                4
c12h24qjIqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257410E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708647E+02                4
c12h24qjAqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30700720E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.35468494E+02                4
c12h24qjBqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548250E+05-0.40257065E+03 0.40548410E+01 0.14563353E+00-0.75483309E-04   3
 0.12512436E-07-0.17723781E-11-0.49387801E+05 0.29085918E+02                4
c12h24qjDqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40188138E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.28529505E+02                4
c12h24qjEqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40188141E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.28529449E+02                4
c12h24qjFqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40257443E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.27836452E+02                4
c12h24qjGqC    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40257457E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.27836457E+02                4
c12h24qjAqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30700745E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.35468269E+02                4
c12h24qjBqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548250E+05-0.40257065E+03 0.40548410E+01 0.14563353E+00-0.75483309E-04   3
 0.12512436E-07-0.17723781E-11-0.49387801E+05 0.29085918E+02                4
c12h24qjCqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257355E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27709215E+02                4
c12h24qjEqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40188141E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.28529449E+02                4
c12h24qjFqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40188141E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.28529457E+02                4
c12h24qjGqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40257443E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.27836452E+02                4
c12h24qjHqD    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257440E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708355E+02                4
c12h24qjAqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30700760E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.35468102E+02                4
c12h24qjBqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548250E+05-0.40257065E+03 0.40548410E+01 0.14563353E+00-0.75483309E-04   3
 0.12512436E-07-0.17723781E-11-0.49387801E+05 0.29085918E+02                4
c12h24qjCqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257355E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27709215E+02                4
c12h24qjDqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
```

```
-0.78277070E+05-0.40257410E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708647E+02                4
c12h24qjFqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40188141E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.28529457E+02                4
c12h24qjGqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40257443E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.27836452E+02                4
c12h24qjHqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257440E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708647E+02                4
c12h24qjIqE    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257355E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27709215E+02                4
c12h24qjAqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65876747E+02 0.22729468E-01-0.42166835E-05 0.43703335E-09-0.20425473E-13   2
-0.68579414E+05-0.30700775E+03 0.28333130E+01 0.15045242E+00-0.82321683E-04   3
 0.12297209E-07 0.15358488E-11-0.46638750E+05 0.35467964E+02                4
c12h24qjBqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78548250E+05-0.40257065E+03 0.40548410E+01 0.14563353E+00-0.75483309E-04   3
 0.12512436E-07-0.17723781E-11-0.49387801E+05 0.29085918E+02                4
c12h24qjCqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257355E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27709215E+02                4
c12h24qjDqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257410E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708647E+02                4
c12h24qjEqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257440E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708355E+02                4
c12h24qjGqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277016E+05-0.40257443E+03 0.43497434E+01 0.14357556E+00-0.70512979E-04   3
 0.75291782E-08-0.25386386E-14-0.49147418E+05 0.27836460E+02                4
c12h24qjHqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257440E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27708647E+02                4
c12h24qjIqF    Thergas  c  12h  25o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.82314941E+02 0.27208466E-02-0.94862038E-07 0.35029317E-11-0.15881247E-15   2
-0.78277070E+05-0.40257355E+03 0.43798800E+01 0.14337087E+00-0.70030605E-04   3
 0.70556707E-08 0.16266015E-12-0.49150711E+05 0.27709215E+02                4
c12h24o-EH     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12   2
-0.46618188E+05 0.77192581E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03   3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.51524977E+05 0.53725803E+02                4
c12h24o-AB     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65358406E+02 0.12494700E-01-0.16632614E-05 0.11746017E-09-0.33511910E-14   2
-0.63408750E+05-0.32108548E+03 0.14987871E+00 0.13022466E+00-0.58573245E-04   3
```

```
 0.31506333E-08 0.13436360E-11-0.39122895E+05 0.38736313E+02                4
c12h24o-AC     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.69024658E+02 0.92630628E-02-0.10647324E-05 0.75952418E-10-0.28246683E-14    2
-0.66628820E+05-0.34545840E+03-0.92628926E-01 0.12290266E+00-0.42674110E-04    3
-0.43663664E-08 0.15224315E-11-0.39656012E+05 0.40251457E+02                4
c12h24o-AD     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.69310997E+02 0.89204554E-02-0.93679870E-06 0.50904451E-10-0.90595076E-15    2
-0.75408750E+05-0.34675888E+03 0.25215793E+00 0.13506193E+00-0.63886226E-04    3
 0.46951514E-08 0.12152072E-11-0.49841797E+05 0.33763794E+02                4
c12h24o-AE     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.69310997E+02 0.89204554E-02-0.93679870E-06 0.50904451E-10-0.90595076E-15    2
-0.78126148E+05-0.34947632E+03 0.25215793E+00 0.13506193E+00-0.63886226E-04    3
 0.46951514E-08 0.12152072E-11-0.52559199E+05 0.31046379E+02                4
c12h24o-BC     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30478857E+02 0.64941444E-01-0.21987238E-04 0.35001402E-08-0.21550195E-12    2
-0.51104367E+05-0.12434909E+03-0.27654917E+01 0.14823878E+00-0.88291541E-04    3
 0.17711496E-07 0.17867527E-11-0.41360539E+05 0.49911861E+02                4
c12h24o-BD     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.50262215E+02 0.20885539E+00-0.98297533E-04 0.19734120E-07-0.14317420E-11    2
-0.21734387E+05 0.32048596E+03-0.75951672E+01 0.16697583E+00-0.11701055E-03    3
 0.32943440E-07 0.26131861E-11-0.41335297E+05 0.71574173E+02                4
c12h24o-BE     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60627255E+01 0.12919551E+00-0.54523960E-04 0.10129406E-07-0.69469913E-12    2
-0.47043328E+05 0.76369064E+02-0.49700212E+01 0.16613717E+00-0.11581514E-03    3
 0.30343259E-07 0.21461435E-11-0.51798105E+05 0.55076694E+02                4
c12h24o-BF     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.60627255E+01 0.12919551E+00-0.54523960E-04 0.10129406E-07-0.69469913E-12    2
-0.49760730E+05 0.73651657E+02-0.49700212E+01 0.16613717E+00-0.11581514E-03    3
 0.30343259E-07 0.21461435E-11-0.54515504E+05 0.52359295E+02                4
c12h24o-CD     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30243025E+02 0.65320805E-01-0.22159786E-04 0.35321801E-08-0.21764806E-12    2
-0.50737098E+05-0.12302444E+03-0.25471013E+01 0.14668454E+00-0.84456107E-04    3
 0.13779155E-07 0.32147928E-11-0.41111629E+05 0.48992371E+02                4
c12h24o-CE     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.50403255E+02 0.20911190E+00-0.98443248E-04 0.19767164E-07-0.14343510E-11    2
-0.21409422E+05 0.32126526E+03-0.74140244E+01 0.16572866E+00-0.11403122E-03    3
 0.29978381E-07 0.36618677E-11-0.41083094E+05 0.70805626E+02                4
c12h24o-CF     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.46618188E+05 0.78578720E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.51524977E+05 0.55111954E+02                4
c12h24o-CG     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.49335586E+05 0.75861328E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.54242379E+05 0.52394554E+02                4
c12h24o-DE     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30243025E+02 0.65320805E-01-0.22159786E-04 0.35321801E-08-0.21764806E-12    2
-0.50737098E+05-0.12302444E+03-0.25471013E+01 0.14668454E+00-0.84456107E-04    3
 0.13779155E-07 0.32147928E-11-0.41111629E+05 0.48992371E+02                4
c12h24o-DF     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.50403255E+02 0.20911190E+00-0.98443248E-04 0.19767164E-07-0.14343510E-11    2
-0.21409422E+05 0.32126526E+03-0.74140244E+01 0.16572866E+00-0.11403122E-03    3
 0.29978381E-07 0.36618677E-11-0.41083094E+05 0.70805626E+02                4
c12h24o-DG     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.46618188E+05 0.78578720E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.51524977E+05 0.55111954E+02                4
c12h24o-DH     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.49335586E+05 0.75861328E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.54242379E+05 0.52394554E+02                4
```

```
c12h24o-EF     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30243025E+02 0.65320805E-01-0.22159786E-04 0.35321801E-08-0.21764806E-12    2
-0.50737098E+05-0.12302444E+03-0.25471013E+01 0.14668454E+00-0.84456107E-04    3
 0.13779155E-07 0.32147928E-11-0.41111629E+05 0.48992371E+02                4
c12h24o-EG     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.50403255E+02 0.20911190E+00-0.98443248E-04 0.19767164E-07-0.14343510E-11    2
-0.21409422E+05 0.32126526E+03-0.74140244E+01 0.16572866E+00-0.11403122E-03    3
 0.29978381E-07 0.36618677E-11-0.41083094E+05 0.70805626E+02                4
c12h24o-EH     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.46618188E+05 0.77192581E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.54242379E+05 0.52394554E+02                4
c12h24o-DH     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.64604158E+01 0.12989239E+00-0.54892371E-04 0.10207539E-07-0.70052948E-12    2
-0.49335586E+05 0.75861328E+02-0.49767504E+01 0.16613317E+00-0.11566786E-03    3
 0.30050682E-07 0.23017389E-11-0.54242379E+05 0.52394554E+02                4
c12h24o-FG     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30243025E+02 0.65320805E-01-0.22159786E-04 0.35321801E-08-0.21764806E-12    2
-0.50737098E+05-0.12441060E+03-0.25471013E+01 0.14668454E+00-0.84456107E-04    3
 0.13779155E-07 0.32147928E-11-0.41111629E+05 0.47606220E+02                4
c12h23oAqB     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.68303169E+02 0.14242408E-01-0.21281260E-05 0.18932411E-09-0.81825187E-14    2
-0.86867078E+05-0.32466235E+03 0.30679975E+01 0.13616075E+00-0.64793239E-04    3
 0.38831640E-08 0.22744870E-11-0.63082699E+05 0.33578545E+02                4
c12h23oAqC     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14872218E+02 0.96256666E-01-0.36369940E-04 0.62516072E-08-0.40584235E-12    2
-0.65302551E+05-0.22309265E+02 0.45063829E+00 0.15499631E+00-0.10172198E-03    3
 0.25213360E-07 0.15799707E-11-0.63604375E+05 0.44430820E+02                4
c12h23oAqD     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14872218E+02 0.96256666E-01-0.36369940E-04 0.62516072E-08-0.40584235E-12    2
-0.65302551E+05-0.22309250E+02 0.45063829E+00 0.15499631E+00-0.10172198E-03    3
 0.25213360E-07 0.15799707E-11-0.63604375E+05 0.44430828E+02                4
c12h23oAqE     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14872218E+02 0.96256666E-01-0.36369940E-04 0.62516072E-08-0.40584235E-12    2
-0.65302551E+05-0.22309250E+02 0.45063829E+00 0.15499631E+00-0.10172198E-03    3
 0.25213360E-07 0.15799707E-11-0.63604375E+05 0.44430828E+02                4
c12h23oBqA     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.15217319E+02 0.94843887E-01-0.35529003E-04 0.60679413E-08-0.39202685E-12    2
-0.66363625E+05-0.24252686E+02 0.16674662E+01 0.14756271E+00-0.90540416E-04    3
 0.18080890E-07 0.33457551E-11-0.64586844E+05 0.39194500E+02                4
c12h23oBqC     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62534363E+02 0.21846402E-01-0.42606353E-05 0.45492987E-09-0.21463227E-13    2
-0.88012016E+05-0.29218607E+03 0.20181868E+01 0.14026693E+00-0.72380353E-04    3
 0.94523456E-08 0.11925744E-11-0.66491695E+05 0.38181557E+02                4
c12h23oBqD     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16572111E+02 0.93244396E-01-0.34868543E-04 0.59513354E-08-0.38451138E-12    2
-0.69677359E+05-0.32441208E+02 0.56179512E+00 0.15191604E+00-0.94732452E-04    3
 0.19466960E-07 0.32188922E-11-0.67147820E+05 0.44008404E+02                4
c12h23oBqE     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16394630E+02 0.93533762E-01-0.34999732E-04 0.59749570E-08-0.38601113E-12    2
-0.69606570E+05-0.31446548E+02 0.55152553E+00 0.15195346E+00-0.94735144E-04    3
 0.19380568E-07 0.32807017E-11-0.67146250E+05 0.44056526E+02                4
c12h23oBqF     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16394630E+02 0.93533762E-01-0.34999732E-04 0.59749570E-08-0.38601113E-12    2
-0.69606570E+05-0.31446548E+02 0.55152553E+00 0.15195346E+00-0.94735144E-04    3
 0.19380568E-07 0.32807017E-11-0.67146250E+05 0.44056526E+02                4
c12h23oCqA     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.76621900E+01 0.10759182E+00-0.41895324E-04 0.73555926E-08-0.48468586E-12    2
-0.63982898E+05 0.18185165E+02 0.25562316E+00 0.15438269E+00-0.10169426E-03    3
 0.25218581E-07 0.19567611E-11-0.64992828E+05 0.45891808E+02                4
c12h23oCqB     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.72411165E+01 0.10942182E+00-0.43002736E-04 0.75988282E-08-0.50297711E-12    2
-0.65392379E+05 0.19500549E+02-0.14248180E+01 0.16175640E+00-0.10983443E-03    3
 0.28539050E-07 0.16029742E-11-0.66272750E+05 0.52937412E+02                4
c12h23oCqD     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71996803E+01 0.10948266E+00-0.43017128E-04 0.75979525E-08-0.50264095E-12    2
-0.65376395E+05 0.19733582E+02-0.14936818E+01 0.16221645E+00-0.11089123E-03    3
 0.29542223E-07 0.12665824E-11-0.66265141E+05 0.53231384E+02                4
c12h23oCqE     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33892574E+01 0.11542610E+00-0.45971643E-04 0.82018765E-08-0.54668867E-12    2
-0.64488305E+05 0.41513466E+02-0.25032860E+00 0.15880659E+00-0.10852871E-03    3
 0.28772858E-07 0.15719818E-11-0.67253086E+05 0.47166225E+02                4
c12h23oCqF     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692320E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281734E+05 0.46044930E+02                4
c12h24oCqG     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692320E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281734E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oDqA     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.76967068E+01 0.10753845E+00-0.41878746E-04 0.73546018E-08-0.48478257E-12    2
-0.63995883E+05 0.17992340E+02 0.23746569E+00 0.15450031E+00-0.10196259E-03    3
 0.25479940E-07 0.18641816E-11-0.64990746E+05 0.45969997E+02                4
c12h23oDqB     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33761318E+01 0.11544266E+00-0.45967288E-04 0.81979570E-08-0.54618636E-12    2
-0.64756312E+05 0.41585266E+02 0.13842748E-01 0.15696846E+00-0.10409528E-03    3
 0.24326313E-07 0.31538988E-11-0.67553031E+05 0.46048203E+02                4
c12h23oDqC     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71996803E+01 0.10948266E+00-0.43017128E-04 0.75979525E-08-0.50264095E-12    2
-0.65376395E+05 0.19733582E+02-0.14936818E+01 0.16221645E+00-0.11089123E-03    3
 0.29542223E-07 0.12665824E-11-0.66265141E+05 0.53231384E+02                4
c12h23oDqE     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73643589E+01 0.10920464E+00-0.42880249E-04 0.75708737E-08-0.50074241E-12    2
-0.65441242E+05 0.18814056E+02-0.14586533E+01 0.16199777E+00-0.11043184E-03    3
 0.29153220E-07 0.13794070E-11-0.66269211E+05 0.53079800E+02                4
c12h23oDqF     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oDqG     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oDqH     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oEqA     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.76967068E+01 0.10753845E+00-0.41878746E-04 0.73546018E-08-0.48478257E-12    2
-0.63995883E+05 0.17992340E+02 0.23746569E+00 0.15450031E+00-0.10196259E-03    3
 0.25479940E-07 0.18641816E-11-0.64990746E+05 0.45969997E+02                4
c12h23oEqB     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33892574E+01 0.11542610E+00-0.45971643E-04 0.82018765E-08-0.54668867E-12    2
-0.64760047E+05 0.41513481E+02-0.25032860E+00 0.15880659E+00-0.10852871E-03    3
 0.28772858E-07 0.15719818E-11-0.67524836E+05 0.47166241E+02                4
c12h23oEqC     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.37302625E+01 0.11483195E+00-0.45647826E-04 0.81303977E-08-0.54113344E-12    2
-0.64623277E+05 0.39612732E+02-0.25468725E+00 0.15885507E+00-0.10869584E-03    3
 0.28994917E-07 0.14731003E-11-0.67252859E+05 0.47182285E+02                4
c12h23oEqD     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71996803E+01 0.10948266E+00-0.43017128E-04 0.75979525E-08-0.50264095E-12    2
```

```
-0.65376395E+05 0.19733582E+02-0.14936818E+01 0.16221645E+00-0.11089123E-03    3
 0.29542223E-07 0.12665824E-11-0.66265141E+05 0.53231384E+02                4
c12h23oEqF     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73643589E+01 0.10920464E+00-0.42880249E-04 0.75708737E-08-0.50074241E-12    2
-0.65441242E+05 0.18814056E+02-0.14586533E+01 0.16199777E+00-0.11043184E-03    3
 0.29153220E-07 0.13794070E-11-0.66269211E+05 0.53079800E+02                4
c12h23oEqG     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oEqH     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oEqI     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oFqA     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.76967068E+01 0.10753845E+00-0.41878746E-04 0.73546018E-08-0.48478257E-12    2
-0.63995883E+05 0.17992340E+02 0.23746569E+00 0.15450031E+00-0.10196259E-03    3
 0.25479940E-07 0.18641816E-11-0.64990746E+05 0.45969997E+02                4
c12h23oFqB     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33892574E+01 0.11542610E+00-0.45971643E-04 0.82018765E-08-0.54668867E-12    2
-0.64760047E+05 0.41513481E+02-0.25032860E+00 0.15880659E+00-0.10852871E-03    3
 0.28772858E-07 0.15719818E-11-0.67524836E+05 0.47166241E+02                4
c12h23oFqC     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.37302625E+01 0.11483195E+00-0.45647826E-04 0.81303977E-08-0.54113344E-12    2
-0.64623277E+05 0.39612732E+02-0.25468725E+00 0.15885507E+00-0.10869584E-03    3
 0.28994917E-07 0.14731003E-11-0.67252859E+05 0.47182285E+02                4
c12h23oFqD     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.37302625E+01 0.11483195E+00-0.45647826E-04 0.81303977E-08-0.54113344E-12    2
-0.64623277E+05 0.39612732E+02-0.25468725E+00 0.15885507E+00-0.10869584E-03    3
 0.28994917E-07 0.14731003E-11-0.67252859E+05 0.47182285E+02                4
c12h23oFqE     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.71996803E+01 0.10948266E+00-0.43017128E-04 0.75979525E-08-0.50264095E-12    2
-0.65376395E+05 0.19733582E+02-0.14936818E+01 0.16221645E+00-0.11089123E-03    3
 0.29542223E-07 0.12665824E-11-0.66265141E+05 0.53231384E+02                4
c12h23oFqG     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73643589E+01 0.10920464E+00-0.42880249E-04 0.75708737E-08-0.50074241E-12    2
-0.65441242E+05 0.18814056E+02-0.14586533E+01 0.16199777E+00-0.11043184E-03    3
 0.29153220E-07 0.13794070E-11-0.66269211E+05 0.53079800E+02                4
c12h23oFqH     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c12h23oFqI     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692316E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281727E+05 0.46044930E+02                4
c10h21hco      Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13877097E+02 0.80823220E-01-0.30015182E-04 0.50976761E-08-0.32819841E-12    2
-0.50393605E+05-0.28585449E+02-0.48171708E+00 0.12802774E+00-0.74733660E-04    3
 0.13724462E-07 0.28457690E-11-0.47522379E+05 0.42087368E+02                4
c10h21co       Thergas  c  11h  21o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16049480E+02 0.72896242E-01-0.25578438E-04 0.41744013E-08-0.26140998E-12    2
-0.33139152E+05-0.38432190E+02-0.39882445E+00 0.12847616E+00-0.86529923E-04    3
```

```
 0.28213869E-07-0.25194512E-11-0.29721904E+05 0.42635864E+02                4
nc6h13hco      Thergas  c   7h  14o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.73531265E+01 0.54585181E-01-0.20666961E-04 0.35586569E-08-0.23136422E-12    2
-0.36979840E+05-0.17712097E+01 0.29812413E+00 0.81215702E-01-0.48444803E-04    3
 0.10164990E-07 0.13155567E-11-0.35941785E+05 0.31632582E+02                4
nc5h11hco      Thergas  c   6h  12o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18550850E+02 0.27226539E-01-0.85308702E-05 0.12845166E-08-0.76061431E-13    2
-0.38570086E+05-0.67145988E+02 0.12611849E+01 0.65173849E-01-0.34504916E-04    3
 0.59322045E-08 0.58030284E-12-0.32889258E+05 0.25613186E+02                4
nc8h17coch2    Thergas  c  10h  19o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.16306988E+02 0.64763352E-01-0.22720040E-04 0.37104051E-08-0.23262325E-12    2
-0.28768211E+05-0.44487953E+02-0.12540367E+01 0.12126518E+00-0.82816085E-04    3
 0.26716666E-07-0.21227701E-11-0.24799623E+05 0.43169273E+02                4
nc8h17coch2o2  Thergas  c  10h  19o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13514616E+02 0.75880781E-01-0.27536711E-04 0.46022413E-08-0.29303906E-12    2
-0.42432004E+05-0.20841217E+02 0.50051504E+00 0.12957905E+00-0.91704926E-04    3
 0.29407795E-07-0.16656370E-11-0.40804504E+05 0.39517471E+02                4
nc8h17coc2h4p  Thergas  c  11h  21o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.63286605E+01 0.89330293E-01-0.33553875E-04 0.57430327E-08-0.37168267E-12    2
-0.26037748E+05 0.16193604E+02-0.24650431E+01 0.14372987E+00-0.11650512E-03    3
 0.50934226E-07-0.82820695E-11-0.26509135E+05 0.50928268E+02                4
nc8h17coc2h4o2 Thergas  c  11h  21o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.80370598E+01 0.94299570E-01-0.35675257E-04 0.61392660E-08-0.39895894E-12    2
-0.43564066E+05 0.12455719E+02-0.76814735E+00 0.14578776E+00-0.10395190E-03    3
 0.32047534E-07-0.79341975E-12-0.44142250E+05 0.47392586E+02                4
nc8h17coc2h4o2h Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58751550E+01 0.10131957E+00-0.39717386E-04 0.70053137E-08-0.46306459E-12    2
-0.60572145E+05 0.25748184E+02 0.39993030E+00 0.14300781E+00-0.95848562E-04    3
 0.24989468E-07 0.13632457E-11-0.62091949E+05 0.43495750E+02                4
nc8h17coc2h4o  Thergas  c  11h  21o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58172598E+01 0.93921982E-01-0.35632183E-04 0.61435559E-08-0.39975060E-12    2
-0.42783719E+05 0.20955902E+02-0.20571465E+01 0.14099608E+00-0.98349963E-04    3
 0.29786603E-07-0.60733590E-12-0.43409680E+05 0.51806030E+02                4
nc7h15coc2h4p  Thergas  c  10h  19o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.43805685E+01 0.83317816E-01-0.31508171E-04 0.54213318E-08-0.35230158E-12    2
-0.22559186E+05 0.24663010E+02-0.19080181E+01 0.12950268E+00-0.10383031E-03    3
 0.43907157E-07-0.64749673E-11-0.23652576E+05 0.46781288E+02                4
nc7h15coc2h4o2 Thergas  c  10h  19o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.66463242E+01 0.87344401E-01-0.33151500E-04 0.57189773E-08-0.37233961E-12    2
-0.40306855E+05 0.17811859E+02-0.47229066E+00 0.13340136E+00-0.95789517E-04    3
 0.29632082E-07-0.66018724E-12-0.41258086E+05 0.44348480E+02                4
nc7h15coc3h6-1 Thergas  c  11h  21o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.63286605E+01 0.89330293E-01-0.33553875E-04 0.57430327E-08-0.37168267E-12    2
-0.26037744E+05 0.16193604E+02-0.24650431E+01 0.14372987E+00-0.11650512E-03    3
 0.50934226E-07-0.82820695E-11-0.26509131E+05 0.50928276E+02                4
nc7h15coc3h6o2-1 Therga c  11h  21o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.80370598E+01 0.94299570E-01-0.35675257E-04 0.61392660E-08-0.39895894E-12    2
-0.43564020E+05 0.12455399E+02-0.79828423E+00 0.14599246E+00-0.10443427E-03    3
 0.32521040E-07-0.95861849E-12-0.44138957E+05 0.47520409E+02                4
nhpcoc3h6o2h-1 Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58751550E+01 0.10131957E+00-0.39717386E-04 0.70053137E-08-0.46306459E-12    2
-0.60572145E+05 0.25748184E+02 0.39993030E+00 0.14300781E+00-0.95848562E-04    3
 0.24989468E-07 0.13632457E-11-0.62091949E+05 0.43495750E+02                4
nc7h15coc3h6o-1 Thergas  c  11h  21o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58172598E+01 0.93921982E-01-0.35632183E-04 0.61435559E-08-0.39975060E-12    2
-0.42783691E+05 0.20955276E+02-0.20722151E+01 0.14109844E+00-0.98591154E-04    3
 0.30023358E-07-0.68993531E-12-0.43408031E+05 0.51869465E+02                4
c2h3coc7h15    Thergas  c  10h  18o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59725224E+02-0.91912774E-02 0.10909293E-04-0.28341722E-08 0.23506422E-12    2
-0.53699398E+05-0.28794678E+03 0.36035156E+01 0.89232080E-01-0.32849701E-04    3
-0.12395828E-08 0.43164539E-12-0.32641002E+05 0.22603703E+02                4
```

```
c2h3coc7h14-7  Therm s  c  10h  17o   1    0G  0300.00   5000.00  1393.000    61
 3.17156581E+01 3.98357886E-02-1.36750418E-05 2.12812885E-09-1.23668013E-13    2
-2.44930502E+04-1.33186236E+02-7.11243244E-01 1.19057010E-01-8.99493209E-05    3
 3.64627434E-08-6.16036495E-12-1.34482172E+04 3.99536368E+01                4
c2h3coc7h14-6  Therm s  c  10h  17o   1    0G  0300.00   5000.00  1384.000    71
 3.10650799E+01 3.88895474E-02-1.31339225E-05 2.02306197E-09-1.16770647E-13    2
-2.23504380E+04-1.26677493E+02 2.20293290E-01 1.07789175E-01-7.10237319E-05    3
 2.38337889E-08-3.23664155E-12-1.13305156E+04 4.00885562E+01                4
c11h22         Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29429678E+02 0.51880285E-01-0.16606973E-04 0.25401599E-08-0.15211932E-12    2
-0.31734701E+05-0.12019572E+03-0.12431828E+01 0.12159807E+00-0.64865751E-04    3
 0.90707486E-08 0.25021723E-11-0.21997980E+05 0.43256065E+02                4
c8h17co        Thergas  c   9h  17o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.12934073E+02 0.59532158E-01-0.20787917E-04 0.33827847E-08-0.21150673E-12    2
-0.26490209E+05-0.25848297E+02 0.24538779E+00 0.10333185E+00-0.69277194E-04    3
 0.22403812E-07-0.18833349E-11-0.23959168E+05 0.36324604E+02                4
c7h15co        Thergas  c   8h  15o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.11285434E+02 0.52986119E-01-0.18438002E-04 0.29914826E-08-0.18657219E-12    2
-0.23128760E+05-0.19043266E+02 0.46477064E+00 0.91447301E-01-0.62236912E-04    3
 0.21013266E-07-0.20767316E-11-0.21066467E+05 0.33606785E+02                4
nc6h13co       Thergas  c   7h  13o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.96649866E+01 0.46393119E-01-0.16063821E-04 0.25950120E-08-0.16124495E-12    2
-0.19778736E+05-0.12396614E+02 0.58405828E+00 0.80256075E-01-0.56858960E-04    3
 0.21278636E-07-0.28550747E-11-0.18163047E+05 0.31312418E+02                4
nc7h15coc2h4p  Thergas  c  10h  19o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.43805685E+01 0.83317816E-01-0.31508171E-04 0.54213318E-08-0.35230158E-12    2
-0.22559186E+05 0.24663010E+02-0.19080181E+01 0.12950268E+00-0.10383031E-03    3
 0.43907157E-07-0.64749673E-11-0.23652576E+05 0.46781288E+02                4
Fc12h23oB      Thergas  c  12h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19584553E+02 0.76214433E-01-0.26372138E-04 0.42606976E-08-0.26489024E-12    2
-0.35097953E+05-0.55682175E+02-0.20832729E+01 0.15108085E+00-0.11786615E-03    3
 0.51701864E-07-0.94453750E-11-0.30389527E+05 0.51355843E+02                4
Gc12h23oC      Thergas  c  12h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.75753074E+01 0.95920630E-01-0.35814297E-04 0.61044907E-08-0.39394464E-12    2
-0.30303465E+05 0.11937119E+02-0.26916316E+01 0.15659955E+00-0.12847834E-03    3
 0.57947609E-07-0.10051886E-10-0.30517164E+05 0.53645164E+02                4
nc11h24        Thergas  c  11h  24o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30142891E+02 0.55901308E-01-0.17875118E-04 0.27305311E-08-0.16328814E-12    2
-0.47321574E+05-0.12522218E+03-0.15622267E+01 0.12777385E+00-0.67664558E-04    3
 0.97517185E-08 0.24056503E-11-0.37225332E+05 0.43828564E+02                4
c12h24o-AF     Thergas  c  12h  24o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.67112511E+02 0.11005321E-01-0.13957219E-05 0.10258868E-09-0.35718558E-14    2
-0.74005328E+05-0.33827203E+03-0.16397284E+02 0.19642267E+00-0.13089155E-03    3
 0.25054124E-07 0.26241904E-11-0.46802371E+05 0.10894964E+03                4
c12h24rFqG     Thergas  c  12h  25o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62468964E+02 0.20286489E-01-0.34821771E-05 0.32948388E-09-0.13914884E-13    2
-0.51483621E+05-0.29290509E+03 0.42866871E+00 0.15423299E+00-0.11141217E-03    3
 0.48297878E-07-0.11943759E-10-0.30046043E+05 0.42665569E+02                4
c12h23oCqG     Thergas  c  12h  24o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.39055710E+01 0.11453089E+00-0.45493438E-04 0.80984490E-08-0.53879178E-12    2
-0.64692320E+05 0.38634552E+02 0.13414800E-01 0.15701073E+00-0.10431094E-03    3
 0.24670154E-07 0.29839698E-11-0.67281734E+05 0.46044930E+02                4
c2h3coc8h17    Thergas  c  11h  20o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.66019577E+02-0.10220554E-01 0.12075810E-04-0.31342149E-08 0.25985458E-12    2
-0.58928262E+05-0.32081317E+03 0.40718913E+01 0.96996441E-01-0.31722615E-04    3
-0.61652830E-08 0.21812246E-11-0.35616105E+05 0.22318541E+02                4
c2h3coc8h16-8  Therm s  c  11h  19o   1    0G  0300.00   5000.00  1393.000    71
 3.48864387E+01 4.43242216E-02-1.52156978E-05 2.36788182E-09-1.37600417E-13    2
-2.85919973E+04-1.48788805E+02-8.96902739E-01 1.31075996E-01-9.79251784E-05    3
 3.92078616E-08-6.55100476E-12-1.63429706E+04 4.24998249E+01                4
c2h3coc8h16-7  Therm s  c  11h  19o   1    0G  0300.00   5000.00  1386.000    81
```

```
 3.40293784E+01 4.37111486E-02-1.48184661E-05 2.28784326E-09-1.32250780E-13    2
-2.63684297E+04-1.41123138E+02-5.22287027E-03 1.20076989E-01-7.95873165E-05    3
 2.70754014E-08-3.75928540E-12-1.42210606E+04 4.28036774E+01                4
Ac11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32139709E+02 0.49447678E-01-0.14722081E-04 0.21404236E-08-0.12389918E-12    2
-0.23143955E+05-0.13316728E+03-0.27353895E+01 0.13891962E+00-0.10085774E-03    3
 0.41646153E-07-0.80947159E-11-0.12575211E+05 0.50161373E+02                4
Bc11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31575459E+02 0.49880721E-01-0.14853778E-04 0.21588797E-08-0.12488848E-12    2
-0.24039207E+05-0.12984648E+03-0.17242736E+01 0.13269386E+00-0.89651570E-04    3
 0.32529424E-07-0.52082006E-11-0.13789417E+05 0.45912991E+02                4
Cc11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31728876E+02 0.49570527E-01-0.14733773E-04 0.21415845E-08-0.12405624E-12    2
-0.24052111E+05-0.13059451E+03-0.26652687E+01 0.13938180E+00-0.10457424E-03    3
 0.46100826E-07-0.96621548E-11-0.13698972E+05 0.49832237E+02                4
Dc11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31728876E+02 0.49570527E-01-0.14733773E-04 0.21415845E-08-0.12405624E-12    2
-0.24052111E+05-0.13059451E+03-0.26652687E+01 0.13938180E+00-0.10457424E-03    3
 0.46100826E-07-0.96621548E-11-0.13698972E+05 0.49832237E+02                4
Ec11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31728876E+02 0.49570527E-01-0.14733773E-04 0.21415845E-08-0.12405624E-12    2
-0.24052111E+05-0.13059451E+03-0.26652687E+01 0.13938180E+00-0.10457424E-03    3
 0.46100826E-07-0.96621548E-11-0.13698972E+05 0.49832237E+02                4
Fc11h23        Thergas  c  11h  23o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.31728876E+02 0.49570527E-01-0.14733773E-04 0.21415845E-08-0.12405624E-12    2
-0.24052111E+05-0.13128760E+03-0.26652687E+01 0.13938180E+00-0.10457424E-03    3
 0.46100826E-07-0.96621548E-11-0.13698972E+05 0.49139153E+02                4
c6h10-13       Thergas  c   6h  10o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14707487E+02 0.24929453E-01-0.82048145E-05 0.12798851E-08-0.77687436E-13    2
-0.11381250E+03-0.50755089E+02-0.13453469E+01 0.65607071E-01-0.40644423E-04    3
 0.78475972E-08 0.11541555E-11 0.45251172E+04 0.33178951E+02                4
c7h12-13       Thergas  c   7h  12o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17568602E+02 0.29500853E-01-0.96318163E-05 0.14941219E-08-0.90351968E-13    2
-0.39655293E+04-0.64368454E+02-0.14285507E+01 0.76632805E-01-0.45892160E-04    3
 0.77791240E-08 0.17312890E-11 0.16168496E+04 0.35307041E+02                4
c8h14-13       Thergas  c   8h  14o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20369827E+02 0.34177613E-01-0.11119899E-04 0.17225436E-08-0.10416028E-12    2
-0.77927441E+04-0.77646713E+02-0.16517571E+01 0.88621646E-01-0.53434513E-04    3
 0.99833972E-08 0.15098427E-11-0.12763190E+04 0.38029171E+02                4
c9h16-13       Thergas  c   9h  16o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.23226494E+02 0.38757723E-01-0.12552433E-04 0.19380328E-08-0.11691889E-12    2
-0.11642482E+05-0.91234772E+02-0.19375117E+01 0.10105558E+00-0.62072148E-04    3
 0.13303755E-07 0.88657093E-12-0.41629590E+04 0.41014580E+02                4
c10h18-13      Thergas  c  10h  18o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.26106186E+02 0.43297227E-01-0.13961262E-04 0.21479185E-08-0.12921665E-12    2
-0.15502064E+05-0.10495287E+03-0.18911458E+01 0.11117361E+00-0.65120425E-04    3
 0.11025307E-07 0.22494632E-11-0.70849531E+04 0.42595261E+02                4
c11h20-13      Thergas  c  11h  20o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29002148E+02 0.47806583E-01-0.15351725E-04 0.23533009E-08-0.14113272E-12    2
-0.19367150E+05-0.11875884E+03-0.23039269E+01 0.12447891E+00-0.75828488E-04    3
 0.16392921E-07 0.90705161E-12-0.99578604E+04 0.46119999E+02                4
c12h24rBohA    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.35084621E+02 0.56406122E-01-0.16918635E-04 0.24690345E-08-0.14308380E-12    2
-0.45981820E+05-0.14164502E+03-0.24712164E+01 0.15681706E+00-0.11886217E-03    3
 0.51980699E-07-0.10573021E-10-0.34942207E+05 0.54445942E+02                4
c12h24qjBohA   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.63009232E+02 0.23130568E-01-0.43249902E-05 0.44379084E-09-0.20199227E-13    2
-0.75664383E+05-0.29477847E+03 0.12679416E+01 0.14742985E+00-0.81029015E-04    3
 0.14280253E-07 0.28182144E-12-0.54024246E+05 0.41080322E+02                4
c12h24rCohB    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59522655E+02 0.20827059E-01-0.36736537E-05 0.35719086E-09-0.15499048E-13    2
```

```
-0.58809230E+05-0.28093283E+03-0.65596765E+00 0.14786653E+00-0.10206918E-03    3
 0.42234749E-07-0.10348807E-10-0.37754570E+05 0.45548817E+02                4
c12h24qjCohB   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79598206E+02 0.28372381E-02-0.51132993E-07-0.10178051E-10 0.10175324E-14    2
-0.85688391E+05-0.39117389E+03 0.30647836E+01 0.13861538E+00-0.64584143E-04    3
 0.49032525E-08 0.36783944E-12-0.56834766E+05 0.32259487E+02                4
c12h24rDohC    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59522655E+02 0.20827059E-01-0.36736537E-05 0.35719086E-09-0.15499048E-13    2
-0.58537492E+05-0.28093283E+03-0.65596765E+00 0.14786653E+00-0.10206918E-03    3
 0.42234749E-07-0.10348807E-10-0.37482828E+05 0.45548817E+02                4
c12h24qjDohC   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79598206E+02 0.28372381E-02-0.51132993E-07-0.10178051E-10 0.10175324E-14    2
-0.85416656E+05-0.39117377E+03 0.30647836E+01 0.13861538E+00-0.64584143E-04    3
 0.49032525E-08 0.36783944E-12-0.56563027E+05 0.32259232E+02                4
c12h24rEohD    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59522655E+02 0.20827059E-01-0.36736537E-05 0.35719086E-09-0.15499048E-13    2
-0.58537492E+05-0.28093283E+03-0.65596765E+00 0.14786653E+00-0.10206918E-03    3
 0.42234749E-07-0.10348807E-10-0.37482828E+05 0.45548817E+02                4
c12h24qjEohD   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79598206E+02 0.28372381E-02-0.51132993E-07-0.10178051E-10 0.10175324E-14    2
-0.85416656E+05-0.39117389E+03 0.30647836E+01 0.13861538E+00-0.64584143E-04    3
 0.49032525E-08 0.36783944E-12-0.56563027E+05 0.32259109E+02                4
c12h24rFohE    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59522655E+02 0.20827059E-01-0.36736537E-05 0.35719086E-09-0.15499048E-13    2
-0.58537492E+05-0.28093283E+03-0.65596765E+00 0.14786653E+00-0.10206918E-03    3
 0.42234749E-07-0.10348807E-10-0.37482828E+05 0.45548817E+02                4
c12h24qjFohE   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79598206E+02 0.28372381E-02-0.51132993E-07-0.10178051E-10 0.10175324E-14    2
-0.85416656E+05-0.39117389E+03 0.30647836E+01 0.13861538E+00-0.64584143E-04    3
 0.49032525E-08 0.36783944E-12-0.56563027E+05 0.32259071E+02                4
c12h24rGohF    Thergas  c  12h  25o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59522655E+02 0.20827059E-01-0.36736537E-05 0.35719086E-09-0.15499048E-13    2
-0.58537492E+05-0.28093283E+03-0.65596765E+00 0.14786653E+00-0.10206918E-03    3
 0.42234749E-07-0.10348807E-10-0.37482828E+05 0.45548817E+02                4
c12h24qjGohF   Thergas  c  12h  25o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.79598206E+02 0.28372381E-02-0.51132993E-07-0.10178051E-10 0.10175324E-14    2
-0.85416656E+05-0.39117386E+03 0.30647836E+01 0.13861538E+00-0.64584143E-04    3
 0.49032525E-08 0.36783944E-12-0.56563027E+05 0.32259125E+02                4
c11h23qA       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.33763676E+02 0.57223588E-01-0.18178147E-04 0.27640790E-08-0.16478054E-12    2
-0.58403128E+05-0.13490179E+03 0.38404161E+00 0.13647909E+00-0.76227567E-04    3
 0.11923098E-07 0.28171875E-11-0.48185793E+05 0.41647240E+02                4
c11h23qB       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59244473E+02 0.19519156E-01-0.35831163E-05 0.36025039E-09-0.16053683E-13    2
-0.71590070E+05-0.27985037E+03 0.21903188E+01 0.12760298E+00-0.59643986E-04    3
 0.24156599E-08 0.29471872E-11-0.50997371E+05 0.32786438E+02                4
c11h23qC       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59189087E+02 0.19612784E-01-0.36356130E-05 0.37227091E-09-0.17017549E-13    2
-0.71294703E+05-0.27953799E+03 0.20103211E+01 0.12885165E+00-0.62647348E-04    3
 0.54218421E-08 0.18788632E-11-0.50706359E+05 0.33548756E+02                4
c11h23qD       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59189087E+02 0.19612784E-01-0.36356130E-05 0.37227091E-09-0.17017549E-13    2
-0.71294703E+05-0.27953799E+03 0.20103211E+01 0.12885165E+00-0.62647348E-04    3
 0.54218421E-08 0.18788632E-11-0.50706359E+05 0.33548756E+02                4
c11h23qE       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59189087E+02 0.19612784E-01-0.36356130E-05 0.37227091E-09-0.17017549E-13    2
-0.71294703E+05-0.27953799E+03 0.20103211E+01 0.12885165E+00-0.62647348E-04    3
 0.54218421E-08 0.18788632E-11-0.50706359E+05 0.33548756E+02                4
c11h23qF       Thergas  c  11h  24o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59189087E+02 0.19612784E-01-0.36356130E-05 0.37227091E-09-0.17017549E-13    2
-0.71294703E+05-0.28023108E+03 0.20103211E+01 0.12885165E+00-0.62647348E-04    3
```

```
 0.54218421E-08 0.18788632E-11-0.50706359E+05 0.32855675E+02                4
c11h23qjA      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.34848236E+02 0.52641045E-01-0.15870468E-04 0.23261997E-08-0.13529599E-12    2
-0.41056469E+05-0.14245883E+03-0.85613209E+00 0.13976257E+00-0.85550491E-04    3
 0.20208521E-07 0.22293388E-12-0.30228410E+05 0.45846363E+02                4
c11h23qjB      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59028805E+02 0.17575493E-01-0.29376899E-05 0.27599242E-09-0.11823144E-13    2
-0.53793258E+05-0.28034088E+03 0.70070279E+00 0.13259576E+00-0.73020281E-04    3
 0.14697081E-07-0.10452890E-11-0.33013008E+05 0.38047760E+02                4
c11h23qjC      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59019802E+02 0.17590221E-01-0.29458051E-05 0.27790908E-09-0.11983311E-13    2
-0.53517641E+05-0.28029144E+03 0.75202239E+00 0.13222392E+00-0.72095056E-04    3
 0.13751207E-07-0.70591173E-12-0.32746504E+05 0.37831444E+02                4
c11h23qjD      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59019802E+02 0.17590221E-01-0.29458051E-05 0.27790908E-09-0.11983311E-13    2
-0.53517828E+05-0.28029245E+03 0.85671216E+00 0.13150515E+00-0.70385708E-04    3
 0.12060571E-07-0.11241498E-12-0.32757816E+05 0.37386509E+02                4
c11h23qjE      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59019802E+02 0.17590221E-01-0.29458051E-05 0.27790908E-09-0.11983311E-13    2
-0.53517828E+05-0.28029269E+03 0.85671216E+00 0.13150515E+00-0.70385708E-04    3
 0.12060571E-07-0.11241498E-12-0.32757818E+05 0.37386272E+02                4
c11h23qjF      Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59019802E+02 0.17590221E-01-0.29458051E-05 0.27790908E-09-0.11983311E-13    2
-0.53517828E+05-0.28098584E+03 0.85671216E+00 0.13150515E+00-0.70385708E-04    3
 0.12060571E-07-0.11241498E-12-0.32757818E+05 0.36693119E+02                4
o2cho          Thergas  c   1h   1o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.91168327E+01 0.27886413E-02-0.52545448E-06 0.53696086E-10-0.24061866E-14    2
-0.43972797E+05-0.19570007E+02 0.26673050E+01 0.21311320E-01-0.20434547E-04    3
 0.98506447E-08-0.19626468E-11-0.42205434E+05 0.13638034E+02                4
c11h22-1       Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.29429678E+02 0.51880285E-01-0.16606973E-04 0.25401599E-08-0.15211932E-12    2
-0.31734701E+05-0.12019572E+03-0.12431828E+01 0.12159807E+00-0.64865751E-04    3
 0.90707486E-08 0.25021723E-11-0.21997980E+05 0.43256065E+02                4
c11h22-2       Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28350212E+02 0.53065449E-01-0.17090359E-04 0.26281122E-08-0.15810941E-12    2
-0.32383141E+05-0.11484955E+03-0.16922530E+01 0.12035314E+00-0.63364831E-04    3
 0.95856709E-08 0.18885267E-11-0.22708414E+05 0.45695156E+02                4
c11h22-3       Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28349707E+02 0.53143911E-01-0.17124836E-04 0.26329128E-08-0.15829785E-12    2
-0.32427469E+05-0.11501727E+03-0.28416545E+01 0.12432948E+00-0.66857072E-04    3
 0.97860600E-08 0.23978057E-11-0.22550988E+05 0.51102173E+02                4
c11h22-4       Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28283751E+02 0.53259663E-01-0.17191936E-04 0.26486147E-08-0.15957690E-12    2
-0.32400604E+05-0.11464854E+03-0.28819356E+01 0.12461276E+00-0.67547066E-04    3
 0.10484312E-07 0.21473658E-11-0.22546732E+05 0.51272232E+02                4
c11h22-5       Thergas  c  11h  22o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.28283751E+02 0.53259663E-01-0.17191936E-04 0.26486147E-08-0.15957690E-12    2
-0.32400604E+05-0.11464854E+03-0.28819356E+01 0.12461276E+00-0.67547066E-04    3
 0.10484312E-07 0.21473658E-11-0.22546732E+05 0.51272232E+02                4
c11h23ojA      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.31636427E+02 0.53780943E-01-0.16453059E-04 0.24378120E-08-0.14289320E-12    2
-0.39860398E+05-0.12834479E+03-0.26688824E+01 0.13849889E+00-0.88102344E-04    3
 0.25710076E-07-0.21953374E-11-0.29438543E+05 0.52490276E+02                4
c11h23ojB      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56214909E+02 0.17921753E-01-0.30249059E-05 0.28033534E-09-0.11540020E-13    2
-0.51681883E+05-0.26839679E+03-0.79608101E+00 0.12915428E+00-0.70377551E-04    3
 0.15052356E-07-0.16560487E-11-0.31200379E+05 0.43352112E+02                4
c11h23ojC      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56214909E+02 0.17921753E-01-0.30249059E-05 0.28033534E-09-0.11540020E-13    2
-0.51410086E+05-0.26839828E+03-0.82621789E+00 0.12935898E+00-0.70859925E-04    3
 0.15525861E-07-0.18212471E-11-0.30925340E+05 0.43478733E+02                4
c11h23ojD      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56214909E+02 0.17921753E-01-0.30249059E-05 0.28033534E-09-0.11540020E-13    2
-0.51410277E+05-0.26839941E+03-0.72142589E+00 0.12863950E+00-0.69148911E-04    3
 0.13833574E-07-0.12271709E-11-0.30936664E+05 0.43033283E+02                4
c11h23ojE      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56214909E+02 0.17921753E-01-0.30249059E-05 0.28033534E-09-0.11540020E-13    2
-0.51410277E+05-0.26839966E+03-0.72142589E+00 0.12863950E+00-0.69148911E-04    3
 0.13833574E-07-0.12271709E-11-0.30936664E+05 0.43033020E+02                4
c11h23ojF      Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.56214909E+02 0.17921753E-01-0.30249059E-05 0.28033534E-09-0.11540020E-13    2
-0.51410219E+05-0.26909268E+03-0.75156277E+00 0.12884422E+00-0.69631285E-04    3
 0.14307082E-07-0.13923694E-11-0.30933373E+05 0.42468124E+02                4
c11h22rBqA     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35329391E+02 0.50940111E-01-0.15070217E-04 0.21828648E-08-0.12613024E-12    2
-0.35125672E+05-0.14085628E+03-0.86618376E+00 0.14911753E+00-0.11563650E-03    3
 0.50788920E-07-0.10148190E-10-0.24643818E+05 0.47583115E+02                4
c11h22rCqA     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35329391E+02 0.50940111E-01-0.15070217E-04 0.21828648E-08-0.12613024E-12    2
-0.35125672E+05-0.14085628E+03-0.86618376E+00 0.14911753E+00-0.11563650E-03    3
 0.50788920E-07-0.10148190E-10-0.24643818E+05 0.47583115E+02                4
c11h22rDqA     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35329391E+02 0.50940111E-01-0.15070217E-04 0.21828648E-08-0.12613024E-12    2
-0.35125672E+05-0.14085628E+03-0.86618376E+00 0.14911753E+00-0.11563650E-03    3
 0.50788920E-07-0.10148190E-10-0.24643818E+05 0.47583115E+02                4
c11h22rEqA     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.35329391E+02 0.50940111E-01-0.15070217E-04 0.21828648E-08-0.12613024E-12    2
-0.35125672E+05-0.14085628E+03-0.86618376E+00 0.14911753E+00-0.11563650E-03    3
 0.50788920E-07-0.10148190E-10-0.24643818E+05 0.47583115E+02                4
c11h22rAqB     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59494583E+02 0.16614625E-01-0.26629596E-05 0.24201363E-09-0.10130252E-13    2
-0.47159414E+05-0.27900067E+03 0.94133556E+00 0.13926511E+00-0.94055882E-04    3
 0.35507444E-07-0.79711385E-11-0.26691252E+05 0.38751930E+02                4
c11h22rCqB     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59073990E+02 0.16765980E-01-0.26954528E-05 0.24683047E-09-0.10462430E-13    2
-0.47713438E+05-0.27637891E+03 0.82655346E+00 0.14102526E+00-0.10092468E-03    3
 0.43137977E-07-0.10671204E-10-0.27443203E+05 0.39203609E+02                4
c11h22rDqB     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59073990E+02 0.16765980E-01-0.26954528E-05 0.24683047E-09-0.10462430E-13    2
-0.47713438E+05-0.27637891E+03 0.82655346E+00 0.14102526E+00-0.10092468E-03    3
 0.43137977E-07-0.10671204E-10-0.27443203E+05 0.39203609E+02                4
c11h22rEqB     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59073990E+02 0.16765980E-01-0.26954528E-05 0.24683047E-09-0.10462430E-13    2
-0.47713438E+05-0.27637891E+03 0.82655346E+00 0.14102526E+00-0.10092468E-03    3
 0.43137977E-07-0.10671204E-10-0.27443203E+05 0.39203609E+02                4
c11h22rFqB     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59073990E+02 0.16765980E-01-0.26954528E-05 0.24683047E-09-0.10462430E-13    2
-0.47713438E+05-0.27637891E+03 0.82655346E+00 0.14102526E+00-0.10092468E-03    3
 0.43137977E-07-0.10671204E-10-0.27443203E+05 0.39203609E+02                4
c11h22rAqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59487141E+02 0.16626189E-01-0.26690632E-05 0.24343519E-09-0.10248975E-13    2
-0.46532066E+05-0.27895825E+03 0.97621787E+00 0.13900392E+00-0.93385301E-04    3
 0.34803492E-07-0.77130941E-11-0.26070699E+05 0.38606956E+02                4
c11h22rBqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58967026E+02 0.16968057E-01-0.27444084E-05 0.25112795E-09-0.10560212E-13    2
-0.47441844E+05-0.27587537E+03 0.18554996E+01 0.13372014E+00-0.84507992E-04    3
 0.28071428E-07-0.56891423E-11-0.27271195E+05 0.34913010E+02                4
c11h22rCqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rDqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rEqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rFqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rGqC     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rAqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59487141E+02 0.16626189E-01-0.26690632E-05 0.24343519E-09-0.10248975E-13    2
-0.46532066E+05-0.27895825E+03 0.97621787E+00 0.13900392E+00-0.93385301E-04    3
 0.34803492E-07-0.77130941E-11-0.26070699E+05 0.38606956E+02                4
c11h22rBqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58967026E+02 0.16968057E-01-0.27444084E-05 0.25112795E-09-0.10560212E-13    2
-0.47441844E+05-0.27587537E+03 0.18554996E+01 0.13372014E+00-0.84507992E-04    3
 0.28071428E-07-0.56891423E-11-0.27271195E+05 0.34913010E+02                4
c11h22rCqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rDqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rEqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rFqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rGqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rHqD     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rAqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59487141E+02 0.16626189E-01-0.26690632E-05 0.24343519E-09-0.10248975E-13    2
-0.46532066E+05-0.27895825E+03 0.97621787E+00 0.13900392E+00-0.93385301E-04    3
 0.34803492E-07-0.77130941E-11-0.26070699E+05 0.38606956E+02                4
c11h22rBqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58967026E+02 0.16968057E-01-0.27444084E-05 0.25112795E-09-0.10560212E-13    2
-0.47441844E+05-0.27587537E+03 0.18554996E+01 0.13372014E+00-0.84507992E-04    3
 0.28071428E-07-0.56891423E-11-0.27271195E+05 0.34913010E+02                4
c11h22rCqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rDqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rEqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rFqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rGqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rHqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rIqE     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rKqF     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.58967026E+02 0.16968057E-01-0.27444084E-05 0.25112795E-09-0.10560212E-13    2
-0.47441844E+05-0.27587537E+03 0.18554996E+01 0.13372014E+00-0.84507992E-04    3
 0.28071428E-07-0.56891423E-11-0.27271195E+05 0.34913010E+02                4
c11h22rCqF     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rDqF     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22rEqF     Thergas  c  11h  23o   2    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.59088104E+02 0.16737375E-01-0.26769580E-05 0.24222771E-09-0.10072116E-13    2
-0.47446742E+05-0.27645605E+03 0.94786805E+00 0.14016548E+00-0.98820274E-04    3
 0.41008025E-07-0.99104414E-11-0.27184162E+05 0.38692513E+02                4
c11h22qjBqA    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13    2
-0.64594359E+05-0.29061755E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04    3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717469E+05 0.34551678E+02                4
c11h22qjCqA    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13    2
-0.64594359E+05-0.29061780E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04    3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717465E+05 0.34551437E+02                4
c11h22qjDqA    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13    2
-0.64594359E+05-0.29061789E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04    3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717465E+05 0.34551331E+02                4
c11h22qjEqA    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13    2
-0.64594359E+05-0.29061792E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04    3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717465E+05 0.34551300E+02                4
c11h22qjAqB    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13    2
-0.64594359E+05-0.29131042E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04    3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717469E+05 0.33858791E+02                4
c11h22qjCqB    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15    2
-0.74241656E+05-0.38139301E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04    3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46508883E+05 0.26492912E+02                4
c11h22qjDqB    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15    2
-0.74241656E+05-0.38139313E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04    3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46508883E+05 0.26492805E+02                4
c11h22qjEqB    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15    2
-0.74241656E+05-0.38139313E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04    3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46508883E+05 0.26492775E+02                4
c11h22qjFqB    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15    2
-0.74241656E+05-0.38208618E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04    3
```

```
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46508883E+05 0.25799746E+02                4
c11h22qjAqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13   2
-0.64594359E+05-0.29131073E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04   3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717465E+05 0.33858494E+02                4
c11h22qjBqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.74241570E+05-0.38208356E+03 0.43658519E+01 0.13304369E+00-0.66513399E-04   3
 0.88947392E-08-0.10531796E-11-0.46504156E+05 0.25989969E+02                4
c11h22qjDqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139313E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492805E+02                4
c11h22qjEqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139313E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492775E+02                4
c11h22qjFqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139307E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492828E+02                4
c11h22qjGqC    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139294E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492966E+02                4
c11h22qjAqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13   2
-0.64594359E+05-0.29131094E+03 0.27937393E+01 0.14028563E+00-0.79152465E-04   3
 0.14451897E-07 0.21765986E-12-0.43717465E+05 0.33858273E+02                4
c11h22qjBqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.74241570E+05-0.38208356E+03 0.43658519E+01 0.13304369E+00-0.66513399E-04   3
 0.88947392E-08-0.10531796E-11-0.46504156E+05 0.25989969E+02                4
c11h22qjCqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969961E+05-0.38208533E+03 0.44404049E+01 0.13252963E+00-0.65286433E-04   3
 0.76776017E-08-0.62487960E-12-0.46240434E+05 0.25672462E+02                4
c11h22qjEqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139313E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492775E+02                4
c11h22qjFqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139307E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492828E+02                4
c11h22qjGqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139294E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492966E+02                4
c11h22qjHqD    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139264E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26493250E+02                4
c11h22qjAqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.62632271E+02 0.18930638E-01-0.32656649E-05 0.31841313E-09-0.14206735E-13   2
-0.64594500E+05-0.29131152E+03 0.28684967E+01 0.13977014E+00-0.77922159E-04   3
 0.13231466E-07 0.64711767E-12-0.43725504E+05 0.33541092E+02                4
c11h22qjBqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.74241570E+05-0.38208356E+03 0.43658519E+01 0.13304369E+00-0.66513399E-04   3
 0.88947392E-08-0.10531796E-11-0.46504156E+05 0.25989969E+02                4
```

```
c11h22qjCqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969961E+05-0.38208533E+03 0.44404049E+01 0.13252963E+00-0.65286433E-04   3
 0.76776017E-08-0.62487960E-12-0.46240434E+05 0.25672462E+02                4
c11h22qjDqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38208575E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.25800167E+02                4
c11h22qjFqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139307E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492828E+02                4
c11h22qjGqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139294E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26492973E+02                4
c11h22qjHqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38139264E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.26493250E+02                4
c11h22qjIqE    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969961E+05-0.38139221E+03 0.44404049E+01 0.13252963E+00-0.65286433E-04   3
 0.76776017E-08-0.62487960E-12-0.46240434E+05 0.26365545E+02                4
c11h22qjBqF    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.74241570E+05-0.38208356E+03 0.43658519E+01 0.13304369E+00-0.66513399E-04   3
 0.88947392E-08-0.10531796E-11-0.46504156E+05 0.25989969E+02                4
c11h22qjCqF    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969961E+05-0.38208533E+03 0.44404049E+01 0.13252963E+00-0.65286433E-04   3
 0.76776017E-08-0.62487960E-12-0.46240434E+05 0.25672462E+02                4
c11h22qjDqF    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38208575E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.25800167E+02                4
c11h22qjEqF    Thergas  c  11h  23o   4    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.78200813E+02 0.51446311E-03 0.33426439E-07-0.92486374E-11 0.78202979E-15   2
-0.73969914E+05-0.38208603E+03 0.44102678E+01 0.13273433E+00-0.65768814E-04   3
 0.81511091E-08-0.79007834E-12-0.46237141E+05 0.25799883E+02                4
c11h22o-AB     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.61761105E+02 0.93583167E-02-0.10931037E-05 0.71593467E-10-0.20741906E-14   2
-0.59293055E+05-0.30344788E+03 0.51074451E+00 0.11727142E+00-0.48690839E-04   3
-0.14119025E-08 0.24072270E-11-0.36244320E+05 0.35432552E+02                4
c11h22o-AC     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65472931E+02 0.60588773E-02-0.43966267E-06 0.26214731E-11 0.14201795E-14   2
-0.62536262E+05-0.32808542E+03-0.42121489E-01 0.11210690E+00-0.37987360E-04   3
-0.37287045E-08 0.74040551E-12-0.36744285E+05 0.38261387E+02                4
c11h22o-AD     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65473785E+02 0.62260758E-02-0.61066902E-06 0.47366843E-10-0.23541536E-14   2
-0.71202703E+05-0.32779709E+03 0.52611923E+00 0.12270689E+00-0.55428747E-04   3
 0.15427938E-08 0.17839034E-11-0.46953859E+05 0.30828682E+02                4
c11h22o-AE     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.65473785E+02 0.62260758E-02-0.61066902E-06 0.47366843E-10-0.23541536E-14   2
-0.73920109E+05-0.33051450E+03 0.52611923E+00 0.12270689E+00-0.55428747E-04   3
 0.15427938E-08 0.17839034E-11-0.49671262E+05 0.28111275E+02                4
c11h22o-BC     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28856541E+02 0.58373395E-01-0.19653620E-04 0.31174008E-08-0.19151392E-12   2
-0.47754723E+05-0.11769612E+03-0.25030577E+01 0.13607062E+00-0.80612306E-04   3
 0.15729645E-07 0.17854895E-11-0.38472641E+05 0.47012093E+02                4
c11h22o-BD     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
-0.51536804E+02 0.20224476E+00-0.96372365E-04 0.19521481E-07-0.14257339E-11   2
-0.18613814E+05 0.32493207E+03-0.74693642E+01 0.15575878E+00-0.11161869E-03   3
 0.33240894E-07 0.18084816E-11-0.38432852E+05 0.69252434E+02                4
c11h22o-BE     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.43633566E+05 0.84143242E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.48880727E+05 0.53335598E+02                4
c11h22o-BF     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.46350969E+05 0.81425827E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.51598129E+05 0.50618187E+02                4
c11h22o-CD     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28856541E+02 0.58373395E-01-0.19653620E-04 0.31174008E-08-0.19151392E-12   2
-0.47482980E+05-0.11769612E+03-0.25030577E+01 0.13607062E+00-0.80612306E-04   3
 0.15729645E-07 0.17854895E-11-0.38200895E+05 0.47012093E+02                4
c11h22o-CE     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51536804E+02 0.20224476E+00-0.96372365E-04 0.19521481E-07-0.14257339E-11   2
-0.18342066E+05 0.32493207E+03-0.74693642E+01 0.15575878E+00-0.11161869E-03   3
 0.33240894E-07 0.18084816E-11-0.38161102E+05 0.69252434E+02                4
c11h22o-CF     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.43361824E+05 0.84143242E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.48608980E+05 0.53335598E+02                4
c11h22o-CG     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.46079227E+05 0.81425827E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.51326383E+05 0.50618187E+02                4
c11h22o-DE     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28856541E+02 0.58373395E-01-0.19653620E-04 0.31174008E-08-0.19151392E-12   2
-0.47482980E+05-0.11769612E+03-0.25030577E+01 0.13607062E+00-0.80612306E-04   3
 0.15729645E-07 0.17854895E-11-0.38200895E+05 0.47012093E+02                4
c11h22o-DF     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51536804E+02 0.20224476E+00-0.96372365E-04 0.19521481E-07-0.14257339E-11   2
-0.18342066E+05 0.32493207E+03-0.74693642E+01 0.15575878E+00-0.11161869E-03   3
 0.33240894E-07 0.18084816E-11-0.38161102E+05 0.69252434E+02                4
c11h22o-DG     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.43361824E+05 0.84143242E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.48608980E+05 0.53335598E+02                4
c11h22o-DH     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.78981485E+01 0.12312954E+00-0.52547122E-04 0.98373274E-08-0.67827645E-12   2
-0.46079227E+05 0.81425827E+02-0.49804974E+01 0.15583919E+00-0.11256046E-03   3
 0.32700573E-07 0.63830332E-12-0.51326383E+05 0.50618187E+02                4
c11h22o-EF     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.28856541E+02 0.58373395E-01-0.19653620E-04 0.31174008E-08-0.19151392E-12   2
-0.47482980E+05-0.11769612E+03-0.25030577E+01 0.13607062E+00-0.80612306E-04   3
 0.15729645E-07 0.17854895E-11-0.38200895E+05 0.47012093E+02                4
c11h22o-EG     Thergas  c  11h  22o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
-0.51536804E+02 0.20224476E+00-0.96372365E-04 0.19521481E-07-0.14257339E-11   2
-0.18342066E+05 0.32354593E+03-0.74693642E+01 0.15575878E+00-0.11161869E-03   3
 0.33240894E-07 0.18084816E-11-0.38161102E+05 0.67866280E+02                4
Cc11h21-1      Thergas  c  11h  21o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30291183E+02 0.47227841E-01-0.14217740E-04 0.20833058E-08-0.12122742E-12   2
-0.15989535E+05-0.12450703E+03-0.98954874E+00 0.12080202E+00-0.72356495E-04   3
 0.19161130E-07-0.13640726E-11-0.61371968E+04 0.41685932E+02                4
Dc11h21-2      Thergas  c  11h  21o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30060251E+02 0.47212686E-01-0.14150766E-04 0.20636501E-08-0.11951299E-12   2
-0.17846117E+05-0.12386946E+03 0.14945374E+00 0.11560564E+00-0.67087887E-04   3
 0.18215147E-07-0.18271632E-11-0.81824297E+04 0.35865696E+02                4
Ec11h21-3      Thergas  c  11h  21o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.29886240E+02 0.47598906E-01-0.14365391E-04 0.21112554E-08-0.12324156E-12   2
```

```
-0.17820072E+05-0.12312794E+03-0.10053401E+01 0.11966792E+00-0.70858208E-04   3
 0.18744709E-07-0.14485693E-11-0.80253579E+04 0.41227791E+02                4
Fc11h21-4      Thergas  c  11h  21o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30029163E+02 0.47344245E-01-0.14215711E-04 0.20758397E-08-0.12033183E-12   2
-0.17876775E+05-0.12394975E+03-0.11821504E+01 0.12089573E+00-0.73800016E-04   3
 0.21671781E-07-0.24815263E-11-0.80065151E+04 0.41949368E+02                4
Gc11h21-5      Thergas  c  11h  21o   0    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.30029163E+02 0.47344245E-01-0.14215711E-04 0.20758397E-08-0.12033183E-12   2
-0.17876775E+05-0.12464283E+03-0.11821504E+01 0.12089573E+00-0.73800016E-04   3
 0.21671781E-07-0.24815263E-11-0.80065151E+04 0.41256287E+02                4
c11h22rBohA    Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.32133385E+02 0.51996078E-01-0.15586820E-04 0.22774251E-08-0.13228774E-12   2
-0.42094227E+05-0.12753127E+03-0.23853462E+01 0.14576796E+00-0.11354485E-03   3
 0.51965465E-07-0.11115363E-10-0.32034156E+05 0.52305889E+02                4
c11h22rConB    Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56213005E+02 0.17146459E-01-0.27906167E-05 0.25268246E-09-0.10311919E-13   2
-0.54799258E+05-0.26487662E+03-0.41499355E+00 0.13573587E+00-0.94144663E-04   3
 0.39614715E-07-0.99707994E-11-0.34863031E+05 0.42752804E+02                4
c11h22rDohC    Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56213005E+02 0.17146459E-01-0.27906167E-05 0.25268246E-09-0.10311919E-13   2
-0.54527516E+05-0.26487662E+03-0.41499355E+00 0.13573587E+00-0.94144663E-04   3
 0.39614715E-07-0.99707994E-11-0.34591285E+05 0.42752804E+02                4
c11h22rEohD    Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56213005E+02 0.17146459E-01-0.27906167E-05 0.25268246E-09-0.10311919E-13   2
-0.54527516E+05-0.26487662E+03-0.41499355E+00 0.13573587E+00-0.94144663E-04   3
 0.39614715E-07-0.99707994E-11-0.34591285E+05 0.42752804E+02                4
c11h22rFohE    Thergas  c  11h  23o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.56213005E+02 0.17146459E-01-0.27906167E-05 0.25268246E-09-0.10311919E-13   2
-0.54527516E+05-0.26487662E+03-0.41499355E+00 0.13573587E+00-0.94144663E-04   3
 0.39614715E-07-0.99707994E-11-0.34591285E+05 0.42752804E+02                4
c11h22qjBohA   Thergas  c  11h  23o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59849731E+02 0.19178402E-01-0.32847618E-05 0.30550662E-09-0.12463959E-13   2
-0.71712914E+05-0.27955463E+03 0.13224676E+01 0.13661884E+00-0.76333403E-04   3
 0.14932684E-07-0.51226720E-12-0.51113148E+05 0.39070518E+02                4
c11h22qjCohB   Thergas  c  11h  23o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.75419800E+02 0.75062469E-03 0.22669437E-09-0.19655850E-11 0.17107347E-15   2
-0.81356203E+05-0.37032935E+03 0.31724644E+01 0.12742960E+00-0.58973059E-04   3
 0.46260653E-08-0.91507985E-13-0.53929262E+05 0.30025452E+02                4
c11h22qjDohC   Thergas  c  11h  23o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.75469711E+02 0.65983174E-03 0.54290272E-07-0.14717456E-10 0.12161028E-14   2
-0.81103719E+05-0.37060590E+03 0.30310361E+01 0.12839152E+00-0.61244602E-04   3
 0.68646639E-08-0.87718271E-12-0.53642090E+05 0.30626978E+02                4
c11h22qjEohD   Thergas  c  11h  23o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.75469711E+02 0.65983174E-03 0.54290272E-07-0.14717456E-10 0.12161028E-14   2
-0.81103719E+05-0.37060599E+03 0.30310361E+01 0.12839152E+00-0.61244602E-04   3
 0.68646639E-08-0.87718271E-12-0.53642090E+05 0.30626886E+02                4
c11h22qjFohE   Thergas  c  11h  23o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.75469711E+02 0.65983174E-03 0.54290272E-07-0.14717456E-10 0.12161028E-14   2
-0.81103719E+05-0.37060596E+03 0.30310361E+01 0.12839152E+00-0.61244602E-04   3
 0.68646639E-08-0.87718271E-12-0.53642090E+05 0.30626894E+02                4
c11h21oAqB     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.64887383E+02 0.10777190E-01-0.13662512E-05 0.10092258E-09-0.35641668E-14   2
-0.82821703E+05-0.30803040E+03 0.30342302E+01 0.12595230E+00-0.61521947E-04   3
 0.59368563E-08 0.99049545E-12-0.60162004E+05 0.31944944E+02                4
c11h21oAqC     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13429610E+02 0.89379020E-01-0.33870947E-04 0.58331300E-08-0.37912655E-12   2
-0.62024613E+05-0.16659790E+02 0.79328460E+00 0.14227030E+00-0.92702219E-04   3
 0.21897781E-07 0.20476635E-11-0.60725027E+05 0.41191628E+02                4
c11h21oAqD     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13108773E+02 0.89928597E-01-0.34157012E-04 0.58937042E-08-0.38368102E-12   2
-0.61897328E+05-0.14868484E+02 0.62244833E+00 0.14343621E+00-0.95445903E-04   3
```

```
 0.24570610E-07 0.11268487E-11-0.60706516E+05 0.41917561E+02                 4
c11h21oAqE     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13108773E+02 0.89928597E-01-0.34157012E-04 0.58937042E-08-0.38368102E-12  2
-0.61897328E+05-0.14868484E+02 0.62244833E+00 0.14343621E+00-0.95445903E-04  3
 0.24570610E-07 0.11268487E-11-0.60706516E+05 0.41917561E+02                 4
c11h21oBqA     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13220496E+02 0.88914923E-01-0.33527027E-04 0.57556342E-08-0.37336551E-12  2
-0.62865098E+05-0.15508011E+02 0.18628907E+01 0.13583802E+00-0.83864499E-04  3
 0.17030041E-07 0.30417418E-11-0.61691508E+05 0.36581276E+02                 4
c11h21oBqC     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59232594E+02 0.18142678E-01-0.33665310E-05 0.35303113E-09-0.16843165E-13  2
-0.84002344E+05-0.27616550E+03 0.20998106E+01 0.12927806E+00-0.67282104E-04  3
 0.97242934E-08 0.52695457E-12-0.63583641E+05 0.36056492E+02                 4
c11h21oBqD     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14974863E+02 0.86628512E-01-0.32505333E-04 0.55617186E-08-0.35998112E-12  2
-0.66336500E+05-0.25924515E+02 0.46967277E+00 0.14221080E+00-0.92977105E-04  3
 0.23403862E-07 0.11215341E-11-0.64222035E+05 0.42609623E+02                 4
c11h21oBqE     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14820356E+02 0.86879097E-01-0.32613927E-04 0.55800191E-08-0.36104610E-12  2
-0.66275727E+05-0.25059784E+02 0.53077090E+00 0.14175686E+00-0.91805043E-04  3
 0.22147328E-07 0.15973990E-11-0.64228168E+05 0.42354919E+02                 4
c11h21oBqF     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.14820356E+02 0.86879097E-01-0.32613927E-04 0.55800191E-08-0.36104610E-12  2
-0.66275727E+05-0.25059784E+02 0.53077090E+00 0.14175686E+00-0.91805043E-04  3
 0.22147328E-07 0.15973990E-11-0.64228168E+05 0.42354919E+02                 4
c11h21oCqA     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.59638362E+01 0.10117807E+00-0.39664850E-04 0.69990169E-08-0.46292332E-12  2
-0.60606133E+05 0.25252365E+02 0.54547644E+00 0.14202334E+00-0.93553354E-04  3
 0.22773934E-07 0.21198293E-11-0.62107848E+05 0.42876057E+02                 4
c11h21oCqB     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54489698E+01 0.10317067E+00-0.40854571E-04 0.72586746E-08-0.48235759E-12  2
-0.61979867E+05 0.27088310E+02-0.99854708E+00 0.14843987E+00-0.99364755E-04  3
 0.23738371E-07 0.26113469E-11-0.63402219E+05 0.49345413E+02                 4
c11h21oCqD     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54489698E+01 0.10317067E+00-0.40854571E-04 0.72586746E-08-0.48235759E-12  2
-0.61979863E+05 0.27088310E+02-0.99854708E+00 0.14843987E+00-0.99364755E-04  3
 0.23738371E-07 0.26113469E-11-0.63402215E+05 0.49345413E+02                 4
c11h21oCqE     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61135781E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64373602E+05 0.43934074E+02                 4
c11h21oCqF     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19424843E+01 0.10857680E+00-0.43487842E-04 0.77848537E-08-0.51988156E-12  2
-0.61215578E+05 0.47170990E+02-0.54731313E-01 0.14710818E+00-0.10198746E-03  3
 0.27930582E-07 0.11677790E-11-0.64358145E+05 0.44548534E+02                 4
c11h21oCqG     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.19424843E+01 0.10857680E+00-0.43487842E-04 0.77848537E-08-0.51988156E-12  2
-0.61215578E+05 0.47170990E+02-0.54731313E-01 0.14710818E+00-0.10198746E-03  3
 0.27930582E-07 0.11677790E-11-0.64358145E+05 0.44548534E+02                 4
c11h21oDqA     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58906975E+01 0.10129115E+00-0.39697112E-04 0.69997994E-08-0.46256819E-12  2
-0.60578883E+05 0.25661041E+02 0.34891254E+00 0.14336853E+00-0.96729229E-04  3
 0.25879238E-07 0.10457100E-11-0.62086598E+05 0.43710800E+02                 4
c11h21oDqB     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61407527E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64645348E+05 0.43934074E+02                 4
c11h21oDqC     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.51995387E+01 0.10359896E+00-0.41073061E-04 0.73036572E-08-0.48564061E-12  2
-0.61882352E+05 0.28478401E+02-0.10979470E+01 0.14910032E+00-0.10087086E-03  3
 0.25154975E-07 0.21414990E-11-0.63391203E+05 0.49770218E+02                 4
c11h21oDqE     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54489698E+01 0.10317067E+00-0.40854571E-04 0.72586746E-08-0.48235759E-12  2
-0.61979863E+05 0.27088310E+02-0.99854708E+00 0.14843987E+00-0.99364755E-04  3
 0.23738371E-07 0.26113469E-11-0.63402215E+05 0.49345413E+02                 4
c11h21oDqF     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oDqG     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oDqH     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oEqA     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.58906975E+01 0.10129115E+00-0.39697112E-04 0.69997994E-08-0.46256819E-12  2
-0.60578883E+05 0.25661041E+02 0.34891254E+00 0.14336853E+00-0.96729229E-04  3
 0.25879238E-07 0.10457100E-11-0.62086598E+05 0.43710800E+02                 4
c11h21oEqB     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61407531E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64645352E+05 0.43934074E+02                 4
c11h21oEqC     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61135781E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64373602E+05 0.43934082E+02                 4
c11h21oEqD     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.51995387E+01 0.10359896E+00-0.41073061E-04 0.73036572E-08-0.48564061E-12  2
-0.61882352E+05 0.28478401E+02-0.10979470E+01 0.14910032E+00-0.10087086E-03  3
 0.25154975E-07 0.21414990E-11-0.63391203E+05 0.49770218E+02                 4
c11h21oEqF     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.54489698E+01 0.10317067E+00-0.40854571E-04 0.72586746E-08-0.48235759E-12  2
-0.61979863E+05 0.27088310E+02-0.99854708E+00 0.14843987E+00-0.99364755E-04  3
 0.23738371E-07 0.26113469E-11-0.63402215E+05 0.49345413E+02                 4
c11h21oEqG     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oEqH     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oEqI     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.18278092E+01 0.10878298E+00-0.43612712E-04 0.78151698E-08-0.52242157E-12  2
-0.61170055E+05 0.47808228E+02 0.31726027E+00 0.14451410E+00-0.95727097E-04  3
 0.21659304E-07 0.33930489E-11-0.64397730E+05 0.42975231E+02                 4
c11h21oFqB     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61407531E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64645352E+05 0.43934074E+02                 4
c11h21oFqC     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61135781E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64373602E+05 0.43934082E+02                 4
c11h21oFqD     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.17429124E+01 0.10893209E+00-0.43696862E-04 0.78343678E-08-0.52395387E-12  2
-0.61135781E+05 0.48282646E+02 0.90556934E-01 0.14609489E+00-0.99542056E-04  3
 0.25480926E-07 0.20370314E-11-0.64373602E+05 0.43934082E+02                 4
c11h21oFqE     Thergas  c  11h  22o   3    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
```

```
 0.51995387E+01 0.10359896E+00-0.41073061E-04 0.73036572E-08-0.48564061E-12    2
-0.61882352E+05 0.28478401E+02-0.10979470E+01 0.14910032E+00-0.10087086E-03    3
 0.25154975E-07 0.21414990E-11-0.63391203E+05 0.49770218E+02                   4
nc6h16coch2    Thergas  c   8h  15o   1    0G  0300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13019993E+02 0.51662784E-01-0.18029459E-04 0.29325748E-08-0.18329408E-12    2
-0.22049264E+05-0.30937851E+02-0.97592682E+00 0.98611005E-01-0.71430644E-04    3
 0.26647946E-07-0.34779946E-11-0.18996963E+05 0.38413456E+02                   4
END
```

Étude expérimentale et modélisation de la cinétique de combustion d'alcanes lourds, de kérosènes reformulés et de carburants-modèles − Formation de polluants

Au cours de ces dernières années les activités de recherches sur les carburants reformulés destinés au secteur aéronautique ont considérablement augmenté. En effet, le fort développement du secteur aérien pousse les scientifiques à chercher une alternative au carburéacteur destiné aux aérodynes dans le but d'économiser le pétrole mais aussi de lutter contre le réchauffement climatique et la pollution atmosphérique. Dans cette thèse nous avons mené des expériences d'oxydation sur trois hydrocarbures lourds, un kérosène conventionnel Jet A-1, des kérosènes reformulés (bio-kérosène) et de synthèse (carburant issu de la synthèse Fischer-Tropsch). Ces études ont été réalisées en réacteur auto-agité par jets gazeux à haute pression (10 atm), dans un large domaine de températures (550-1150 K) et à trois richesses (Φ=0,5, 1 et 2). Les analyses par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et la chromatographie en phase gazeuse (CPG-FID-TCD-MS) nous ont permis de mesurer les profils de concentration des réactifs, des produits finals et des intermédiaires stables en fonction de la température. Des mécanismes cinétiques détaillés adaptés aux composés étudiés ont été développés et validés par confrontation avec les résultats expérimentaux.

Mots clés : carburéacteur, kérosène, bio kérosène, kérosène de synthèse, Fischer-Tropsch, réacteur auto-agité, combustion, cinétique, modélisation

Experimental and modeling study of combustion of high alkanes, reformulated kerosenes and surrogate fuels − Pollutants formation

In recent years research activities on reformulated fuels for the aviation industry have increased. Indeed, the strong development of the airline industry pushes scientists to seek for alternative jet fuel intended for aerodynes in order to preserve oil but also to fight against global warming and air pollution. In this thesis we have conducted experiments on the oxidation of three heavy hydrocarbons, a conventional Jet A-1, reformulated jet fuels (bio-kerosene) and synthetic kerosene (Fischer-Tropsch jet fuel). These studies were carried out in jet stirred reactor at high pressure (10 atm), in a wide temperature range (550-1150 K), for three equivalence ratios (Φ=0.5, 1, and 2). Chemical analyses by Fourier Transformed Infra-Red spectrometry (FTIR) and gas chromatography (GC-FID-TCD-MS) allowed us to measure concentration profiles of reactants, stable intermediates and final products versus temperature. Detailed chemical kinetic reaction mechanisms adapted to the studied compounds were developed and validated by comparison with experimental results.

Keywords: jet fuel, kerosene, bio-kerosene, synthetic jet fuel, Fischer-Tropsch, jet-stirred reactor, combustion, kinetic modeling

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement (UPR 3021)
1 C, Avenue de la Recherche Scientifique
45071 Orléans Cedex 2