HAL
open science

Etude cinétique de l'oxydation de constituants de biocarburants et composés modèles : formation de polluants

Casimir Togbe

To cite this version:

Casimir Togbe. Etude cinétique de l'oxydation de constituants de biocarburants et composés modèles : formation de polluants. Alimentation et Nutrition. Université d'Orléans, 2010. Français. NNT : 2010ORLE2031 . tel-00585394

HAL Id: tel-00585394

https://theses.hal.science/tel-00585394v1

Submitted on 29 Aug 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ D'ORLÉANS

ÉCOLE DOCTORALE de SCIENCES ET TECHNOLOGIES

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement

THÈSE présentée par :

Casimir TOGBE

Soutenue publiquement le 27 Octobre 2010

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

Discipline : Chimie - Physique

Etude cinétique de l'oxydation de constituants de biocarburants et composés modèles – Formation de polluants

THÈSE dirigée par :

P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans
Y. BEDJANIAN	Chargé de recherche au CNRS d'Orléans, HDR, co-Directeur

RAPPORTEURS :

S. CAVADIAS	Professeur à l'ENSC-Paris 6
J.-F. PAUWELS	Professeur à l'Université de Lille 1

JURY

Y. BEDJANIAN	Chargé de recherche au CNRS d'Orléans, HDR
S. CAVADIAS	Professeur à l'ENSC-Paris 6
P. DAGAUT	Directeur de recherche au CNRS d'Orléans
G. DAYMA	Maître de Conférences a l'Université d'Orléans – co-Encadrant
C. MORIN	Maître de Conférences à l'UPMC – Paris 6, HDR
J.-F. PAUWELS	Professeur à l'Université de Lille 1 – Président du jury

AVANT-PROPOS

Cette thèse a été réalisée à l'Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et environnement (ICARE) et financée par le Centre National de Recherche Scientifique à Orléans (CNRS-Orléans) sous la direction de Monsieur Philippe Dagaut, Directeur de Recherche au CNRS et directeur de thèse, qui m'a fait pleinement confiance. Je lui exprime toute ma reconnaissance. Durant ces 3 ans et demi (stage Master 2 y compris), avec ses compétences scientifiques et ses conseils, il a su orienter mes recherches aux bons moments. Je l'en remercie sincèrement.

Je souhaite remercier Monsieur Yuri Bedjanian, pour avoir accepté la co-direction de cette thèse.

Je remercie Monsieur Iskender Gökalp, directeur de ICARE, pour sa disponibilité et sa sympathie.

Je remercie tout particulièrement Monsieur Jean-François Pauwels professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, et Monsieur Siméon Cavadias professeur à l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris pour avoir accepté de juger ce travail en qualité de rapporteur et d'y avoir consacré du temps. Mes remerciements s'adressent également à Monsieur Guillaume Dayma et Madame Céline Morin respectivement maitre de conférences à l'Université d'Orléans et à l'institut Jean Le Rond d'Alembert pour l'intérêt qu'ils ont porté à ces travaux. Merci à Guillaume pour m'avoir également encadré.

Un grand merci à Pascal Diévart pour son aide précieuse au long de ces années. Merci beaucoup pour son amitié et ses conseils.

Je remercie également l'ensemble des membres permanents du laboratoire : M Chevrier, A Cadoret, C Chauveau, L. Pillier, S. De Persis, S. Javoy, L. Catoire, J. Sabatier, A. Aymard (parti à la retraite).

Je remercie les membres de l'équipe OH : A. Mzé Ahmed, H. Ramirez et J.-B. May Carle.

Je remercie aussi tous ceux que j'ai rencontrés au laboratoire durant ces 3 ans : A. Matynia, J. Molet, K. Coudoro, Peng, G. Sabard, M. M. Ndem, J. Goulier, M. Karaca, L. Ponty, M. Chahine Pablo, Thomas, François, Rémy, Homan, Fabien, Valérie, Sandro, Tanh, Mai Lan, Sandro, Kamal, Emma, Elodie …Merci pour leur sympathie.

Je souhaite remercier mes amis de longue date du collège : Fabrice Elégbédé, Maurille Agbobatinkpo et Christian Orè Lawin.

Merci à Edwige pour son soutien et son encouragement. Je l'en remercie vraiment.

Je tiens à remercier tous les membres de ma famille pour leur soutien et la confiance qu'ils m'ont accordés durant toutes ces années. J'adresse particulièrement mes remerciements à Dieudonnée, Zoulfath, Albert, Kola, Doriane, Diane, Yann, Maéva, Raymond.

Enfin, à mes parents qui se sont beaucoup sacrifiés pour nous et qui malheureusement ne sont plus de ce monde. C'est à eux que je dédie cette thèse.

Sommaire

I. Contexte de l'étude 13

1. Motivations 13

2. Généralité sur les biocarburants 16

2.1. Le cadre législatif 16

2.2. Les biocarburants de première génération 16

2.3. Les biocarburants de seconde génération 17

2.4. Impact sur les émissions 18

3. Objectifs de ce travail de thèse 18

II. Etude bibliographique 27

1. Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 27

1.1. Zone de basse température 27

1.2. Zone du coefficient négatif de température (CNT) 30

1.3. Domaine de haute température. 30

2. Etat de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques 31

3. Etat de l'art sur l'oxydation des alcools 37

- Le méthanol 38
- L'éthanol 39
- L'isopropanol 40
- Le butan-1-ol 40
- Le pentan-1-ol et le hexan-1-ol 42

III. Dispositif expérimental 57

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux 57

1.1. Principe des réacteurs parfaitement agités 57

1.2. Description du réacteur auto-agité 57

1.3. Calcul des débits gazeux 59

1.4. Prélèvement et échantillonnage des gaz de combustion 60

2. Analyse des gaz de combustion par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) 60

2.1. L'absorption infrarouge 60

2.2. Principe de l'analyse quantitative par infrarouge 61

2.3. Construction de la méthode de dosage en IRTF 61

3. Analyse des gaz de combustion par chromatographie en phase gazeuse (CPG) 63

3.1. Principe de la chromatographie en phase gazeuse 63

3.2. Analyse des composés hydrocarbonés 64

3.3. Analyse de l'hydrogène 64

3.4. Comparaison des mesures de CPG et de IRTF 64

4. Estimation de l'incertitude sur les résultats 65

IV. Modélisation 73

1. Les outils de calcul 73

1.1. Le logiciel CHEMKIN 73

1.2. Le mécanisme réactionnel (fichier chem.inp) 75

1.3. Les données thermodynamiques (fichier therm.dat) 75

1.4. Le code de calcul PSR 76

2. Construction des mécanismes cinétiques 78

2.1. Démarche générale de modélisation 78

2.2. Description générale du mécanisme d'oxydation des esters méthyliques étudiés 79

2.3. Règles de nomenclature 80

2.4. Base C_0-C_4 80

2.5. Construction des différents sous-mécanismes 81

2.6. Description générale du mécanisme d'oxydation des alcools étudiés 85

V. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation d'esters méthyliques 97

1. Etudes expérimentale et de modélisation de l'oxydation des esters méthyliques saturés 97

1.1. Cas du butanoate de méthyle 97

1.2. Oxydation du propanoate d'éthyle 105

1.3. Oxydation du pentanoate de méthyle 115

1.4. Oxydation de l'hexanoate de méthyle 121

1.5. Oxydation de l'heptanoate de méthyle.....126

1.6. Oxydation de l'octanoate de méthyle 134

1.7. Oxydation du nonanoate de méthyle.....143

1.8. Oxydation du décanoate de méthyle 153

2. Etude expérimentale de l'oxydation d'esters méthyliques insaturés.....164

2.1 Oxydation du hex-3-énoate de méthyle. 165

2.3 Oxydation du oct-2-énoate de méthyle 168

2.4 Oxydation du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle 173

3. Comparaison des oxydations d'esters méthyliques saturés et insaturés 186

3.2 Comparaison des vitesses d'oxydation des molécules.....187

3.3 Comparaison des fractions molaires des produits formés.....191

4. Comparaison de l'oxydation des esters et des alcanes.....200

4.1 Comparaison de la réactivité.....200

4.2 Comparaison des fractions molaires de quelques espèces formées 202

VI. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation des alcools.....213

1. Etude de l'oxydation des alcools purs.....213

1.1. Oxydation du méthanol.....213

1.2. Oxydation de l'éthanol 216

1.3. Oxydation du butan-1-ol 222

1.4. Oxydation du pentan-1-ol 247

1.1. Oxydation du hexan-1-ol 255

2. Oxydation de quelques mélanges alcools-hydrocarbures 263

2.1. Oxydation du mélange méthanol/essence 263

2.2. Oxydation des mélanges éthanol/surrogate d'essence (E85).....271

2.3. Oxydation des mélanges éthanol/n-heptane.....278

2.4. Oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85).....285

2.5. Oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 292

VII. Conclusion générale et perspectives.....307

I

Contexte de l’étude

Sommaire

I. Contexte de l'étude 13

1. Motivations 13

2. Généralité sur les biocarburants 16

2.1. Le cadre législatif 16

2.2. Les biocarburants de première génération 16

2.3. Les biocarburants de seconde génération 17

2.4. Impact sur les émissions 18

3. Objectifs de ce travail de thèse 18

I. Contexte de l'étude

1. Motivations

Au cours des dernières décennies, la croissance des revenus, les progrès en matière de technologies, l'amélioration des infrastructures notamment les routes, se sont traduits par une demande de mobilité plus grande : plus de voyages sur des distances moyennes plus importantes. Conséquence de ceci, le transport s'est accru très fortement et devrait poursuivre sa croissance, essentiellement porté par la demande des pays en voie de développement (figure I-1).

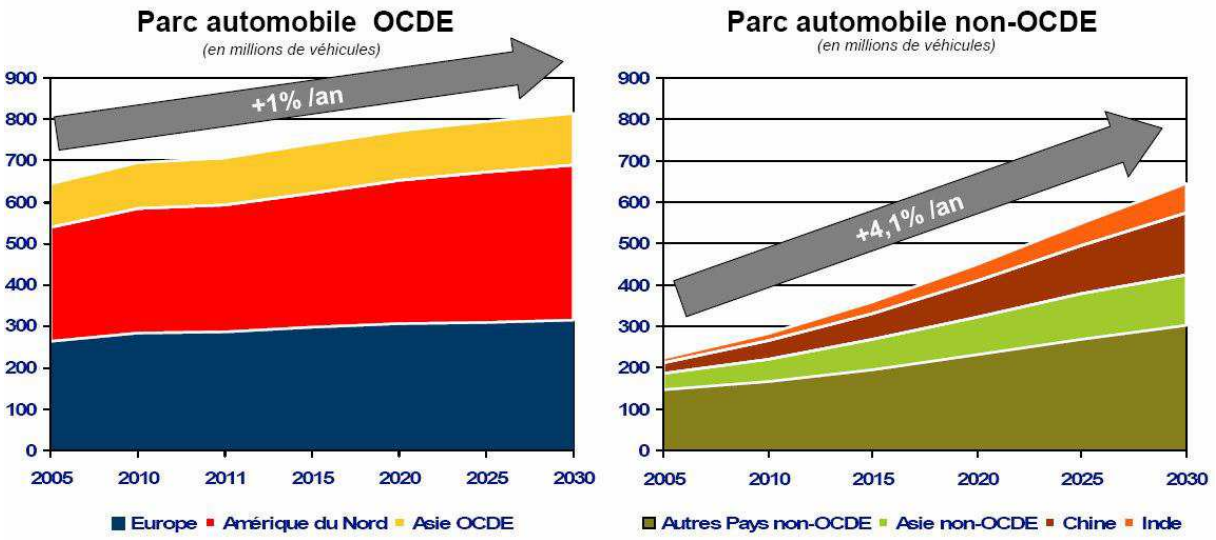


Figure I-1 : Evolution du parc automobile mondial et prévision de sa croissance à l'horizon 2030 [1]

Le pétrole constitue la principale source de carburant pour les automobiles. A l'échelle mondiale, les carburants issus du pétrole constituent 98 % de l'énergie utilisée dans ce secteur. Ce développement du parc automobile mondial aux cours de ces dernières années s'accompagne de problèmes de pollution.

Les conséquences de cette pollution sur l'environnement et la santé sont de nos jours une importante préoccupation et concernent les particuliers, les pouvoirs publics, l'industrie pétrolière, et les constructeurs automobiles. Les principaux polluants imputables au secteur automobile sont les oxydes d'azote (NO_x), les hydrocarbures imbrûlés (HC), le monoxyde de carbone (CO) et les particules (PM). Plusieurs directives communautaires ont été adoptées pour limiter les rejets polluants des véhicules en fixant des limites maximales d'émission et en prévoyant des mesures fiscales intéressantes dans le secteur des transports pour inciter les constructeurs et les consommateurs à adopter des comportements plus respectueux de l'environnement. En Europe, ce sont les normes Euro qui règlementent les émissions des principaux polluants. Outre ces polluants, les moteurs diesel contribuent largement à l'émission des particules, du fait de l'augmentation du parc automobile utilisant le gazole, ce qui constitue un inconvénient majeur pour ces types de moteur. Ces particules font également partie des polluants visés par les réglementations

européennes. Ces normes sont régulièrement revues et mises à jour obligeant ainsi les constructeurs à diminuer les émissions des moteurs. Les tableaux I-1 et I-2 récapitulent les restrictions des normes EURO I à EURO V limitant les émissions de polluants à l'échappement des véhicules diesel et essences de particuliers. Les valeurs de la norme VI sont indiquées à titre d'information.

Diesel	**Date de mise en application**	**CO**	**NOx**	**HC + NOx**	**Particules**
Euro I	1992	2,72	/	0,97	0,140
Euro II	1996	1,00	/	0,90	0,100
Euro III	2000	0,64	0,50	0,56	0,050
Euro IV	2005	0,50	0,25	0,30	0,025
Euro V	2009	0,50	0,18	0,23	0,005
Euro VI	2012	*0,50*	*0,06*	*0,17*	*0,005*

Tableau I-1 : Récapitulatif des normes européennes EURO limitant les émissions (g. km^{-1}) de polluants à l'échappement des véhicules Diesel. [2]

Diesel	**Date de mise en application**	**CO**	**HC**	**NOx**	**HC + NOx**	**Particules**
Euro I	1992	2,72	/	/	0,97	0,140
Euro II	1996	2,30	/	/	0,97	0,100
Euro III	2000	2,20	0,20	0,15	/	0,050
Euro IV	2005	1,00	0,10	0,08	/	0,025
Euro V	2009	1,00	0,10	0,07	/	0,010
Euro VI	2012	*≤1,00*	*0,10*	*0,06*	*/*	*/*

Tableau I-2 : Récapitulatif des normes européennes EURO limitant les émissions (g. km^{-1}) de polluants à l'échappement des véhicules Essence. [2]

Cette explosion du parc automobile mondial s'accompagne également d'un important rejet de CO_2 dans l'atmosphère. Les émissions de CO_2 liées au transport ont quasiment doublé ces trente dernières années et devraient encore augmenter dans les années à venir (figure I-2). Contrairement aux polluants réglementés cités ci-dessus (CO, NO_x, HC, PM), les émissions de CO_2 ne sont actuellement pas soumises à des restrictions. Cependant, le CO_2 étant impliqué dans l'effet de serre et donc probablement dans le réchauffement climatique, l'Union Européenne va imposer dès 2012, une réduction de ses émissions de 8% par rapport à celles de 1990. Cela correspond pour les voitures neuves à une émission de 120g/km comparée à la valeur de 140g/km déjà en vigueur depuis 2008. Afin de respecter ces limitations des émissions polluantes, les constructeurs

automobiles encouragés par les pouvoirs publics s'intéressent à développer de nouveaux systèmes énergétiques.

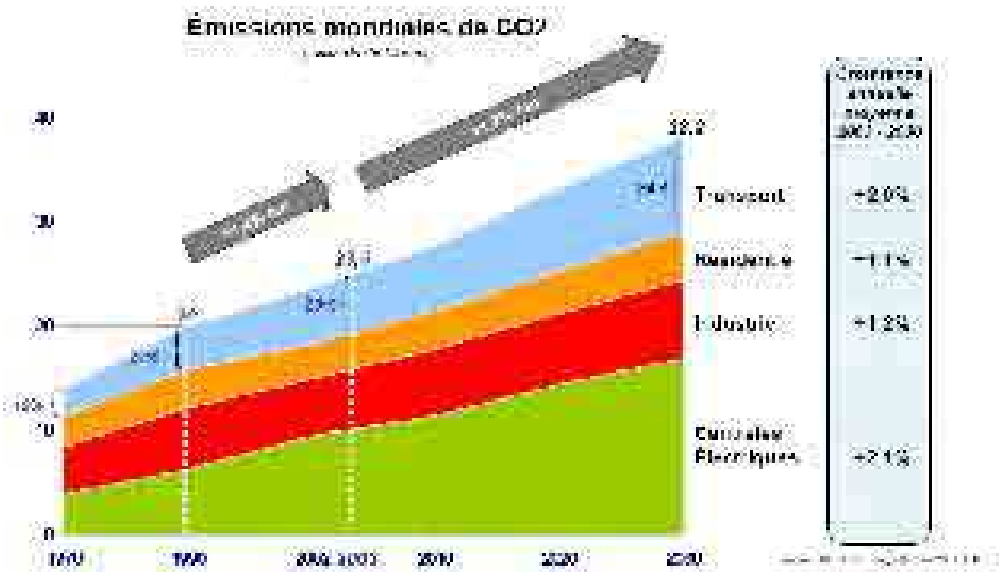


Figure I-2 : évolution des émissions mondiales de CO_2 et prévisions à l'horizon 2030 pouvoirs publics. [3]

Parallèlement, ce développement des transports terrestres participe aussi à un épuisement des réserves de pétrole. Le problème des réserves de pétrole est critique, même si les chiffres permettent un optimisme raisonnable. Les chiffres de réserves publiés par deux revues de référence (Oil and Gas Journal et BP Statistical Review) concordent pour annoncer des réserves de l'ordre de 1200 milliards de barils pour BP Statistical Review, un peu plus pour Oil and Gas qui intègre une grande partie des réserves en sables bitumineux du Canada. Mais ces chiffres sont parfois contestés. Et il est clair pour tout le monde que les réserves d'hydrocarbures sont finies et donc épuisables.

La maîtrise de la demande grandissante d'énergie et des conditions d'approvisionnement constitue un enjeu politique majeur pour l'ensemble de la planète. Elle est rendue d'autant plus difficile que l'humanité doit faire face à un double défi :

Celui de la satisfaction des besoins énergétiques d'une population mondiale qui croîtra encore au cours des prochaines décennies, et dont une large part aspire à un développement économique et social fondé sur une demande accrue d'énergie.

Celui posé par la nécessaire diminution des émissions des gaz à effet de serre, inhérentes à l'utilisation des combustibles fossiles (pétrole, charbon, etc.), et des émissions d'autres gaz polluants.

Dans ce contexte, le transport, dépendant fortement des produits pétroliers, étudie toutes les voies possibles pour un développement plus durable. Une multitude de solutions ont fait et continuent de faire l'objet de travaux de recherche et de développement, l'objectif étant de combiner diminution de la dépendance au pétrole et réduction de l'impact sur l'environnement, notamment en termes de rejets de gaz à effet de serre. Ces travaux portent sur l'amélioration des solutions alternatifs tant en terme de motorisation (pile à combustion, véhicule électrique, véhicule

hydride), que sur les carburants (biocarburants, gaz naturel, hydrogène).

L'après-pétrole se révèle être un sujet épineux dont il faut se préoccuper. Dans ce travail de thèse, nous nous intéresserons à la solution « biocarburant » qui offre des perspectives.

2. Généralité sur les biocarburants

Issus d'une matière première renouvelable (biomasse) qui constitue un « puits » de CO_2 par photosynthèse, le développement des biocarburants peut contribuer à la lutte contre les émissions de gaz à effet de serre. En effet cette biomasse renouvelable, à la différence des énergies fossiles (pétrole, charbon, etc.), utilise pour sa croissance et ses besoins énergétiques le dioxyde de carbone présent dans l'atmosphère. Par ailleurs, l'utilisation de ces carburants en mélange dans les carburants conventionnels permet d'envisager un gain au niveau des émissions de gaz à effet de serre par le secteur des transports, sans modification majeure des infrastructures de distribution, ni modification des véhicules.

L'évaluation des émissions de gaz à effet de serre du puits à la roue, c'est-à-dire de la production de la matière première à la combustion des produits finaux, montre que l'utilisation des biocarburants permet une réduction nette des émissions par rapport aux carburants traditionnels ([4-7]). Cependant, il est important de préciser que ces nouveaux carburants ne représentent pas les seules solutions aux problèmes des émissions polluantes.

2.1. Le cadre législatif

L'introduction des biocarburants dans les carburants conventionnels est accompagnée d'une volonté politique qui a un double objectif, celui de desserrer la contrainte pétrolière et celui de réduire les émissions de gaz à effet de serre.

La commission européenne a proposé dès 2001 un plan d'action pour la promotion des biocarburants et des carburants de substitution dans les transports routiers. L'objectif de ce plan est le remplacement de 20 % d'énergie renouvelable (biocarburants, gaz naturel, hydrogène, etc.) dans les carburants traditionnels. Et en 2003, le conseil et le Parlement européen ont validé cette proposition de loi sous la directive 2003/30/CE, fixant des objectifs croissants d'incorporation de biocarburants dans le domaine des transports. Cette incorporation de carburants d'origine végétale devra représentée au minimum 5,75 % des consommations globales d'essence et de gazole en 2010 et 10 % en 2020.

Il existe deux grandes filières de production de biocarburants : les filières de première génération et celles de seconde génération.

2.2. Les biocarburants de première génération

Ils regroupent selon le mode de production utilisé deux grands types de produits. Nous avons la filière biodiesel et celle des alcools dont le plus connu est l'éthanol.

- La filière « biodiesel »

Le biodiesel est un carburant qui peut être utilisé pur et/ou mélangé dans le gazole pour les moteurs Diesel. Il est constitué d'esters méthyliques d'huiles végétales (EMHV), eux-mêmes

provenant d'huiles végétales (tournesol, colza, palme, soja, etc.). En effet, les esters sont des hydrocarbures obtenus par réaction de transestérification entre les triglycérides et les alcools. Dans notre cas, l'alcool utilisé est le méthanol, d'où l'appellation « esters méthyliques ». Les esters méthyliques ont ainsi pour formule R-COOCH$_3$, où R est un groupement alkyle. La figure I-3 présente une réaction de transestérification entre un triglycéride et le méthanol.

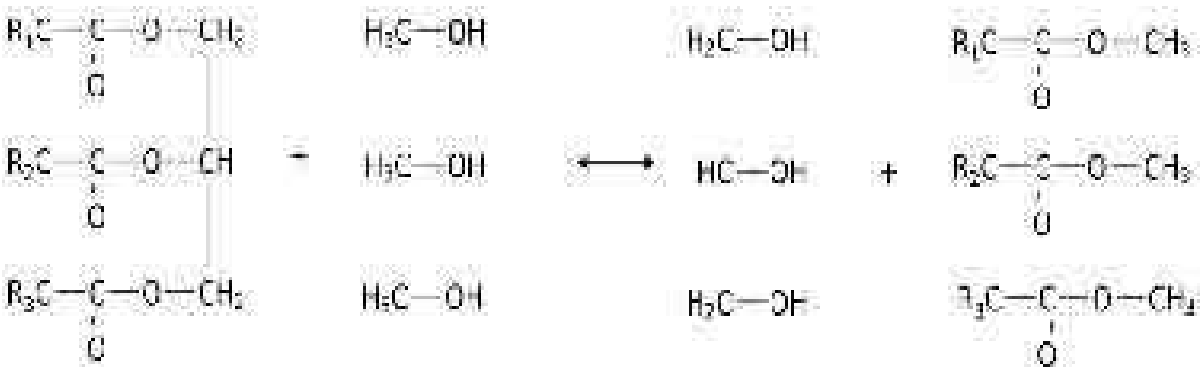


Figure I-3 : Réaction de transestérification entre un triglycéride et du méthanol

Ils sont actuellement développés et utilisés comme carburant alternatif. Ils sont incorporés dans la composition des gazoles jusqu'à 5% en volume car ils présentent des caractéristiques à la combustion similaires à celles des gazoles (viscosité, indice de cétane, etc.). L'indice de cétane est l'un des principaux indicateurs de la qualité du gazole et caractérise le délai d'allumage du carburant au moment de son injection dans la chambre de combustion.

- La filière « alcool »

Les alcools (principalement l'éthanol) sont produits à partir des plantes sucrières (betterave, canne à sucre) et des céréales (blé, maïs, orge). Ils sont utilisés pour la reformulation des essences commerciales à des proportions variables selon les pays (5-10% en France, 5-85% aux Etats-Unis, jusqu'à 100% au Brésil, etc.). Les alcools, de formule R-OH, présentent de nombreuses caractéristiques intéressantes notamment des indices d'octane élevés (l'indice d'octane indique la résistance au cliquetis d'un carburant dans un moteur à allumage commandé).

Les perspectives de développement de ces biocarburants de première génération sont réelles, mais leur production soulève parfois de sérieuses interrogations dans la société par la concurrence qu'ils créent avec les besoins alimentaires des populations. De plus, les quantités produites de nos jours restent encore limitées et ne peuvent se substituer qu'à une faible proportion du carburant d'origine fossile. Les voies de production dites de seconde génération promettent une augmentation de la production de ces carburants, sans concurrence avec les utilisations alimentaires, qui demeureront toujours prioritaires.

2.3. Les biocarburants de seconde génération

Afin de résoudre l'épineux problème de compétition entre les différents usages des ressources agricoles, i.e. alimentation vs. production d'énergie, les biocarburants dits de seconde génération sont apparus. Dans ce cas, les matières premières sont sous la forme de biomasse lignocellulosique. Il s'agit essentiellement de résidus d'origine agricole non consommables (pailles, tiges de maïs), de résidus forestiers et de sous produits issus de la transformation du bois. Les déchets organiques des industries papetières et agroalimentaires constituent également d'importantes ressources. La transformation de ces nouvelles ressources en carburants est en cours de développement. Deux

voies de production sont développées [8]:

- La voie thermochimique, encore appelée voie sèche. Dans ce cas, la biomasse est transformée soit en huile par pyrolyse, soit en un mélange riche en CO et H_2 (gaz de synthèse) par gazéification. Par les méthodes de synthèse Fischer-Tropsch, le mélange CO-H_2 est transformé en carburant liquide. Cette voie thermochimique a la particularité de produire du carburant pour les moteurs Diesel.

- La voie biochimique ou voie humide. Concernant ce procédé, les deux principaux composants de la biomasse à savoir la cellulose et les hémicelluloses, sont transformés en éthanol, pendant que le troisième constituant, la lignine, est utilisé pour fournir l'énergie nécessaire à la transformation.

L'utilisation des EMHV dans les moteurs Diesel et celle des alcools nécessitent une meilleure compréhension des mécanismes d'oxydation de ces nouveaux carburants. Ainsi, durant ces dernières années, de nombreuses études ([9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19], [20, 21]) ont été menées sur leur cinétique d'oxydation et la formation de polluants afin d'évaluer l'impact de ces nouveaux carburants sur les émissions polluantes.

2.4. Impact sur les émissions

L'utilisation des biocarburants permet de résoudre une partie du problème sur l'émission des gaz à effet de serre, mais ne résout pas de façon significative les problèmes d'émissions de polluants.

La présence d'oxygène dans les alcools, lorsqu'ils sont ajouté à l'essence, se traduit par un impact positif mais faible sur les émissions de HC et CO.

L'absence de soufre et de composés aromatiques dans le biodiesel a un effet de substitution positif. L'addition de ce biocarburant dans le gazole a aussi un impact positif sur l'environnement local en diminuant les émissions d'HC et de particules, mais souvent négatif sur les NOx.

Enfin, l'utilisation des biocarburants permet surtout d'économiser de l'énergie fossile dont on sait que les gisements ne sont pas inépuisables.

3. Objectifs de ce travail de thèse

Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans le cadre de coopérations entre le CNRS et des industriels et visant à comprendre les mécanismes de combustion des biocarburants. Ces nouveaux carburants représentent une alternative intéressante à la réduction des émissions polluantes afin de respecter les normes EURO, et surtout pour pallier aux problèmes liés à la diversification des sources d'approvisionnements énergétiques. L'objectif de cette étude est double. Il s'agit :

1) d'obtenir des données expérimentales permettant de comprendre le comportement des esters méthyliques et alcools lors de leur oxydation à basse et haute température.

2) de développer et valider un modèle cinétique capable de reproduire le comportement de ces composés lors de leur oxydation.

Pour mener à bien cette étude, nous avons procédé en deux étapes : d'une part une étude expérimentale menée en réacteur auto-agité (mesure de la concentration des produits), et d'autre part, une modélisation cinétique utilisant nos résultats expérimentaux pour le développement et la validation d'un mécanisme cinétique pour chaque famille de composés étudiés.

3.1 Choix des molécules

L'un des objectifs de cette étude est de recueillir des informations sur l'oxydation des biocarburants afin d'élaborer et de valider un modèle cinétique détaillé. Les biocarburants regroupant généralement les filières biodiesel (mélange d'esters monoalkyles à longues chaînes carbonées) et alcools d'origine végétale, les molécules choisies pendant ce travail de thèse, font partie de ces deux grandes familles. Le choix des molécules a été fait en tenant compte de la technique expérimentale utilisée et des travaux de modélisation. Ainsi nous avons choisi les esters méthyliques saturés et insaturés relativement légers, comportant entre 5 et 11 atomes de carbone (possédant donc les mêmes comportements que les esters à chaînes plus longues) et les alcools linéaires : le méthanol, l'éthanol, le butan-1-ol, le pentan-1-ol et le hexan-1-ol.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. J.J. Mosconi

   Présentation de J.J Mosconi à la journée sur le changement climatique (13 juin 2006). 2006, http://www.université.total.com

2. A. Piperel

   Impact des propriétés des gaz d'échappement recyclés sur l'initiation et le déroulement de la combustion: caractérisation paramétrique de la réactivité de l'EGR, Thèse, Université d'Orléans, 2008

3. T. Dubois

   Etude des mécanismes cinétiques à haute température de mélanges représentatifs de carburants dans des conditions de fonctionnement proches des moteurs HCCI, Thèse, Université d'Orléans, 2009

4. M. S. Graboski and R.L. McCormick

   Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines. Progress in Energy and Combustion Science, 1998, **24** (2): p. 125-164.

5. R. L. McCormick, M. S. Graboski, T. L. Alleman, A. M. Herring and S. K. Tyson

   Impact of biodiesel source material and chemical structure on emissions of criteria pollutants from a heavy-duty engine. Environmental Science & Technology, 2001. **35** (9): p. 1742-1747.

6. C.K. Westbrook, W.J. Pitz, and H.J. Curran

   Chemical kinetic modeling study of the effects of oxygenated hydrocarbons on soot emissions from diesel engines. Journal of Physical Chemistry a, 2006. **110** (21): p. 6912-6922.

7. A. K. Agarwal

   Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines. Progress in Energy and Combustion Science, 2007. **33** (3): p. 233-271.

8. D. Ballerini

   Les biocarburants: Etat des lieux, perspectives et enjeux du développement. Editions Technip, Paris, 2006.

9. S. Gail, M. J. Thomson, S. M. Sarathy, S. A. Syed, P. Dagaut, P. Diévart, A. J. Marchese and F. L. Dryer

A wide-ranging kinetic modeling study of methyl butanoate combustion. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(1): p. 305-311.

10. S. M. Sarathy, S. Gail, S. A. Syed, M. J. Thomson and P. Dagaut

A comparison of saturated and unsaturated C-4 fatty acid methyl esters in an opposed flow diffusion flame and a jet stirred reactor. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**: p. 1015-1022.

11. Dagaut, P., 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. **31** (2): p. 2955-2961.

12. W. K. Metcalfe, S. Dooley, H. J. Curran, J. M. Simmie, A. M. El-Nahas and M. V. Navarro

Experimental and modeling study of C5H10O2 ethyl and methyl esters. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111** (19): p. 4001-4014.

13. Dooley, S., H.J. Curran, and J.M. Simmie,

Autoignition measurements and a validated kinetic model for the biodiesel surrogate, methyl butanoate. Combustion and Flame, 2008. **153** (1-2): p. 2-32.

14. K. HadjAli, M. Crochet, G. Vanhove, M. Ribaucour and R. Minetti

A study of the low temperature autoignition of methyl esters. Proceedings of the Combustion Institute, 2009. **32**(1): p. 239-246.

15. G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. Energy and Fuels, 2008. **22** (3): p. 1469-1479.

16. 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. **23** (9): p. 4254-4268.

17. J. T. Moss, A. M. Berkowitz, M. A. Oehlschlaeger, J. Biet, V. Warth, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc

An Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of the Four Isomers of Butanol. Journal of Physical Chemistry A, 2008. **112** (43): p. 10843-10855.

18. M. V. Johnson, S. S. Goldsborough, Z Serinyel, P. O'Toole, E. Larkin, G. O'Malley and H. J. Curran

A Shock Tube Study of n- and iso-Propanol Ignition. Energy and Fuels, 2009. **23**: p. 5886-5898.

19. P. Dagaut and C. Togbé

Oxidation kinetics of butanol-gasoline surrogate mixtures in a jet-stirred reactor: Experimental and modeling study. Fuel, 2008. **87**(15-16): p. 3313-3321.

20. P. Dagaut, S. M. Sarathy, 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. **32**: p. 229-237.

21. A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, U. Niemann, E. Ranzi, R. Seiser and K. Seshadri

An experimental and kinetic modeling study of n-propanol and iso-propanol combustion. Combustion and Flame, 2010. **157**(1): p. 2-16

II

Etude bibliographique

Sommaire

II. Etude bibliographique 27

1. Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures 27

1.1. Zone de basse température 27

1.2. Zone du coefficient négatif de température (CNT) 30

1.3. Domaine de haute température. 30

2. Etat de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques 31

3. Etat de l'art sur l'oxydation des alcools 37

- Le méthanol 38
- L'éthanol 39
- L'isopropanol 40
- Le butan-1-ol 40
- Le pentan-1-ol et le hexan-1-ol 42

II. Etude bibliographique

Dans ce chapitre, nous présenterons les différents régimes d'oxydation des hydrocarbures. Ensuite nous effectuerons une revue bibliographique des études menées sur l'oxydation des esters méthyliques et des alcools.

1. Généralités sur l'oxydation des hydrocarbures

L'oxydation des hydrocarbures est désormais bien connue. Malgré quelques disparités, l'ensemble des familles chimiques a été expérimentalement étudié dans un large domaine de température et de pression. Selon la température, les mécanismes mis en jeu lors de l'oxydation des composés sont différents. Il existe principalement trois régimes de température dans la cinétique d'oxydation des hydrocarbures. Le premier est appelé mécanisme de «basse température» et se caractérise par une lente réactivité et une faible exothermicité (« flamme froide »). Le deuxième régime, qui fait suite au premier et qui s'intègre à la zone de basse température, présente une diminution de la réactivité lorsque la température augmente : c'est la zone du «coefficient négatif de température (CNT)». Enfin, le dernier régime est celui communément appelé « mécanisme d'oxydation de haute température». Dans cette zone la vitesse d'oxydation est beaucoup plus rapide et les réactions de rupture de liaisons y prédominent. Les trois régimes d'oxydation sont présentés sur la figure II-1.

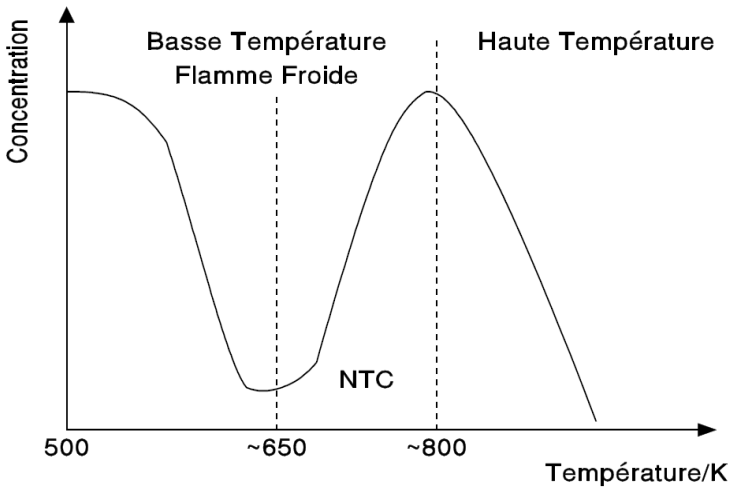


Figure II-1 Différents régimes d'oxydation observés en fonction de la température

1.1.Zone de basse température

Dans cette zone, le mécanisme d'oxydation commence par une réaction d'initiation. Les molécules d'oxygène, O_2, présentes dans le milieu réactionnel vont arracher un atome d'hydrogène

au réactif hydrocarboné RH pour former des radicaux alkyles R. Très rapidement, cette réaction devient négligeable laissant place à des réactions de métathèse : le réactif hydrocarboné initial RH est attaqué par de petits radicaux X (X=OH, H, HO_2, O, …) formés dans le milieu. Ainsi, nous avons :

$$RH + O_2 \rightleftarrows R + HO_2$$

$$RH + X \rightleftarrows R + HX$$

Les molécules d'oxygène vont ensuite s'additionner aux radicaux alkyles R formés pour donner des radicaux peroxyalkyles RO_2 qui vont réagir selon différentes voies. Nous avons :

- une réaction de dismutation avec un autre radical peroxyalkyle $R'O_2$ pour former des radicaux alkoxy RO et de l'oxygène O_2 selon la réaction :

$$RO_2 + R'O_2 \rightarrow RO + R'O + O_2$$

- une réaction d'arrachement d'hydrogène sur une molécule R'H pour former une molécule hydroperoxyalkyle RO_2H qui va se décomposer ensuite en radicaux alkoxy et hydroxyle.

$$RO_2 + R'H \rightleftarrows R' + RO_2H$$

$$RO_2H \rightleftarrows RO + OH$$

- une réaction d'isomérisation pour former un radical hydroperoxyalkyle QO_2H via un état de transition cyclique. Le radical formé QO_2H va aussi réagir de diverses manières, soit par décomposition pour donner un radical hydroperoxy HO_2 et une oléfine ou bien un radical OH et différents produits (éthers cycliques et composés oxygénés), soit par fixation sur une molécule d'oxygène pour former un radical O_2QO_2H. Ce nouveau radical formé va à son tour s'isomériser et se dégrader pour libérer deux radicaux hydroxyles.

$$RO_2 \rightleftarrows QO_2H$$

$$QO_2H \rightleftarrows \text{produits} + OH$$

$$QO_2H + O_2 \rightleftarrows O_2QO_2H$$

$$O_2QO_2H \rightleftarrows HO_2Q'O_2H$$

$$HO_2QO_2H \rightleftarrows 2\ OH + OQ'O$$

Cette zone de basse température est alors dominée par un processus de peroxydation-isomérisation (figure II-2).

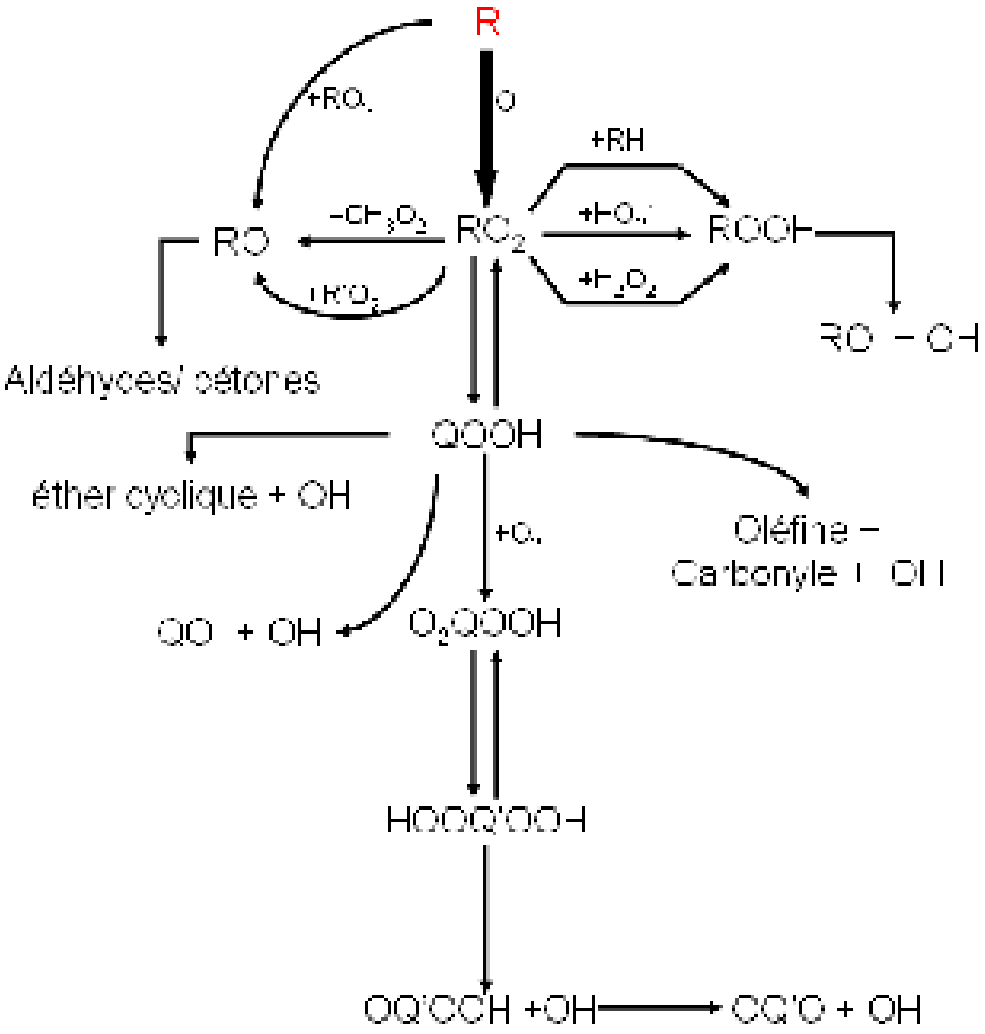


Figure II-2 Schéma simplifié du mécanisme à basse température [1, 2]

1.2.Zone du coefficient négatif de température (CNT)

Cette zone (ca. 650 K – 770K) se situe entre les zones de basse température et de haute température. Dans cette zone, nous observons une diminution de la réactivité. Cette baisse de réactivité a plusieurs explications. En effet, lorsque la température augmente, les réactions (a), (b), et (c) perdent leur importance

$$QO_2H + O_2 \rightleftarrows O_2QO_2H \qquad (a)$$

$$O_2QO_2H \rightleftarrows HO_2Q'O_2H \qquad (b)$$

$$R + O_2 \rightleftarrows RO_2 \qquad (c)$$

L'augmentation de la température dans cette zone va provoquer un déplacement de l'équilibre de ces trois réactions vers les réactifs (de la droite vers la gauche), ce qui va entraîner une diminution importante de la formation des radicaux OH et une augmentation de celle des radicaux alkyles. Les réactions importantes, dans ce domaine (CNT) sont alors :

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

$$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$$

L'accumulation des radicaux HO_2, nombreux et bien moins réactifs que les radicaux OH, entraînent donc une baisse de réactivité

1.3.Domaine de haute température.

Dans ce domaine et juste après la zone de coefficient négatif de température, il apparaît un nouveau processus de ramification faisant augmenter ainsi la réactivité. Les radicaux H_2O_2 vont se décomposer en deux radicaux OH beaucoup plus réactifs.

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

A plus haute température, la décomposition des radicaux alkyles devient plus rapide que leur réaction avec l'oxygène O_2. Ces radicaux alkyles vont se décomposer alors en alcènes et petits radicaux, notamment H et CH_3. Les radicaux méthyles sont consommés par des réactions de terminaison, les radicaux H vont créer une nouvelle ramification de chaîne ($H + O_2 \rightleftarrows OH + O$), et les alcènes vont se dégrader et/ou s'oxyder jusqu'à la formation de monoxyde de carbone. Le monoxyde de carbone sera ensuite oxydé en dioxyde de carbone CO_2 majoritairement par le radical OH selon la réaction :

$$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$$

Le mécanisme d'oxydation des hydrocarbures à haute température peut-être globalement résumé par :

$$RH + O_2 \rightarrow R + HO_2$$

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

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

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

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

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

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

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

$$H_2O_2 \rightarrow 2\ OH$$

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

2. Etat de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques

La cinétique d'oxydation des esters méthyliques n'est pas encore aussi bien étudiée que celle d'autres composés (alcanes, aromatiques, etc.…). Néanmoins, d'après leur structure, on peut distinguer une partie spécifique au groupement ester ($O{=}C{-}O{-}CH_3$) et une autre (chaîne latérale) qui se comporte comme un alcane ou un alcène. Ces dernières années, des études ont donc été menées dans différents laboratoires à l'aide de diverses techniques expérimentales afin de comprendre davantage la combustion de ces esters.

Les premiers travaux concernant les esters méthyliques portent sur l'oxydation de composés de petite taille : formate de méthyle [3], [4]), acétate de méthyle ([3], [5], [6]). Ces travaux essentiellement expérimentaux, ont permis d'identifier les espèces intermédiaires qui sont : le méthanol, le formaldéhyde, le méthane, l'éthane et l'éthylène.

Fischer *et al.* [7], développent pour la première fois, un mécanisme cinétique détaillé décrivant l'oxydation du butanoate de méthyle et du méthanoate de méthyle. Les paramètres cinétiques des espèces sont obtenus en utilisant la méthode d'additivité des groupes et par estimation. Le modèle cinétique proposé a été validé sur des données expérimentales obtenues par Parsons portant sur l'oxydation du butanoate de méthyle et du méthanoate de méthyle en réacteur statique. Ce travail réalisé par ces auteurs constituait ainsi une base théorique importante pour la suite des travaux de modélisation.

Sarathy *et al.,* en 2007 [8], étudient l'oxydation du butanoate de méthyle en réacteur à écoulement à haute pression (12,5 atm) et des températures variant entre 500 et 900 K. Les profils d'espèces simulés en utilisant le mécanisme de Fischer sont en accord raisonnable avec les résultats expérimentaux dans leurs conditions d'étude.

Gaïl *et al.,* en 2007 [9], étudient l'oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité et en réacteur à écoulement. Ils proposent un nouveau mécanisme en apportant quelques modifications à celui de Fischer. Ce nouveau modèle comportant 1498 réactions et 295 espèces a été validé à partir de leurs résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité dans un large domaine de température (800-1350 K), à richesse φ=1,13, à pression atmosphérique et pour un temps de passage égal à 0,07 s. En réacteur à écoulement les conditions expérimentales sont : la température comprise entre 500 et 900 K, la pression fixe de 1,266 MPa, à des richesses de 0,35 et 1,00 et un temps de passage égal à 1,80. L'étude en flamme de diffusion à contre courant est menée à pression.

Une année plus tard, Gaïl *et al.* [10], publient une autre étude sur l'oxydation du butanoate de méthyle et du crotonate de méthyle (but-2-énoate de méthyle) en réacteur auto-agité et en flamme de diffusion à contre courant. Dans leurs travaux, ils étudient l'effet de la double liaison présente dans la chaîne alkyle du crotonate de méthyle et de la fonction ester. Les expériences en réacteur auto-agité ont été réalisées à pression atmosphérique, dans un large domaine de température (850-1400 K), en milieu pauvre (φ=0,375 et 0,750) et à un temps de passage fixe de 0,07 s. Les expériences en flamme de diffusion à contre courant ont également été réalisées à pression atmosphérique, avec un flux de comburant, constitué de 42 % d'oxygène et 58 % d'azote et un flux de réactif constitué de 4,7 % d'ester fortement dilué dans 95 % d'azote. Ils obtiennent une réactivité

très proche entre les deux esters avec des quantités d'acétylène, d'allène, de propyne et de buta-1,3-diène plus importantes dans le cas de l'oxydation du crotonate de méthyle.

Metcafe *et al.* [11] mesurent les délais d'auto-inflammation du butanoate de méthyle et du propanoate d'éthyle en tube à choc pour des pressions de 1 et 4 atm, dans un domaine de température allant de 1100 à 1670 K et de richesse compris entre 0,25 et 1,5. Ils comparent la réactivité des deux esters et observent que le propanoate d'éthyle est plus réactif que le butanoate de méthyle. Cette différence de réactivité serait due non pas à la faible énergie d'activation de la réaction d'élimination menant à la formation d'éthylène, mais plutôt à la réactivité des produits formés et également à la structure de la molécule. Un travail de simulation a également été mené et un modèle cinétique a été proposé à l'issue de ce travail. Ce mécanisme d'oxydation validé en tube à choc, a récemment été modifié pour simuler des résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité à Orléans lors de l'oxydation du propanoate d'éthyle [12]. Les résultats expérimentaux en réacteur auto-agité sont obtenus dans une large gamme de conditions : la température variant entre 750 et 1100 K, quatre richesses (0,3, 0,6, 1,0 et 2), un temps de passage de 0,7 s et une pression de 10 atm.

En 2008, Dooley *et al.* [13] étudient également l'auto-inflammation du butanoate de méthyle dans deux dispositifs expérimentaux différents: en tube à choc et en machine à compression rapide. Les expériences en tube à choc sont effectuées entre 1250 et 1760 K, la richesse variant entre 0,25 et 1,50, à 1 et 4 atm et avec des concentrations en hydrocarbure de 1,0 et 1,5 %. En machine à compression rapide, les conditions de travail sont les suivantes : la température varie entre 640 et 949 K, les pressions sont de 10, 20 et 40 atm, des concentrations en réactif sont de 1,59 et 3,13 % et les richesses comprises entre 0,33 et 1,0. Les résultats montrent une absence de la chimie de basse température du butanoate de méthyle, constat en accord avec les travaux précédents de Gail *et al.* [9].

En 2009, Farooq *et al.* [14], étudient la décomposition de l'acétate de méthyle, du propanoate de méthyle et du butanoate de méthyle en tube à choc entre 1260 et 1653 K, des pressions allant de 1,4 à 1,7 atm avec des concentrations en réactifs compris entre 2 et 3 %.

Walton *et al.*, en 2009 [15], quant à eux, s'intéressent à l'étude de l'auto-inflammation du butanoate de méthyle et du propanoate d'éthyle en machine à compression rapide à une température comprise entre 935 et 1117 K, une pression variant entre 4,7 et 19,6 atm et une richesse comprise entre 0,3 à 0,4. Ils remarquent également que le propanoate d'éthyle s'enflamme plus vite que le butanoate de méthyle. Ils proposent également un nouveau modèle de l'oxydation du butanoate de

méthyle et du propanoate d'éthyle, basé sur le modèle développé par Metcalfe *et al.* [11]

Dagaut *et al.* [16], réalisent une étude cinétique d'oxydation de l'ester méthylique d'huile de colza (RME) en réacteur auto-agité à pression atmosphérique (1 atm) et à haute pression (10 atm), dans un large domaine de température (800-1400 K), la richesse variant entre 0,25 et 1,5 et pour des temps de passage de 0,07 s et 0,7 s. La comparaison de leurs résultats avec ceux de Ristori *et al.* [17] et de Dagaut *et al.* en 2006 [18] sur l'oxydation du n-hexadécane et du kérosène montre une forte ressemblance entre la réactivité de ces différents carburants. Fort de cette observation, ils utilisent alors le modèle d'oxydation du n-hexadécane (1841 réactions et 225 espèces) développé dans l'équipe pour simuler les résultats du RME. La comparaison entre les profils expérimentaux et simulés, mis à part le CO_2 à haute température, est satisfaisante.

Szybist *et al.*, en 2007 [19], choisissent le décanoate de méthyle comme molécule représentative du biodiesel et étudient son oxydation en moteur CFR. Ces auteurs observent une chimie à basse température et une formation précoce de CO_2 lors de l'oxydation du décanoate de méthyle. Ils expliquent cette formation précoce de CO_2 par son élimination directe de la fonction carbonyle. De plus, ces auteurs détectent plusieurs produits de réaction et en particulier des esters méthyliques saturés et insaturés grâce aux techniques d'analyses utilisées (IRTF et GC-MS).

Zhang *et al.*, en 2009 [20], étudient eux aussi en moteur une série de 4 esters : nonanoate de méthyle, nonanoate d'éthyle, non-2-énoate de méthyle et non-3-énoate de méthyle. Ils identifient les espèces intermédiaires et montrent que les esters insaturés sont moins réactifs que les esters saturés à basse température. Ils expliquent cette faible réactivité par une diminution des cycles à 6 ou 7 membres formés pendant l'oxydation des esters due à la présence de la double liaison. Ils remarquent également que cet effet inhibiteur est plus ou moins important selon la position de la double liaison sur la chaîne alkyle. Plus récemment, en 2010, les mêmes auteurs réalisent une étude expérimentale de l'oxydation de l'hexanoate d'éthyle et de l'heptanoate de méthyle en moteur à une richesse de 0,25. Les analyses de dégagement de chaleur et la comparaison de concentration de CO formé entre les deux esters, montrent que l'heptanoate de méthyle possède une réactivité plus élevée que l'hexanoate d'éthyle à basse température. Ils estiment que cela est dû à la longueur de la chaîne alkyle des esters. Ils observent également l'existence de réactions d'élimination moléculaire à six centres lors de l'oxydation à basse température de l'hexanoate d'éthyle. Ces diverses observations sont également confirmées lors des études sur l'oxydation du propanoate d'éthyle menées d'une part par Metcalfe *et al.* [11] et [12] en tube à choc ($1100 \leq T \leq 1670$; $0,25 \leq \Phi \leq 1,5$; P = 1 et 4 atm) et en réacteur auto-agité ($750 \leq T \leq 1100$; $0,3 \leq \Phi \leq 2$; P = 10 atm), et d'autre part par Schwartz *et al.* [21] en flamme (méthane/air non prémélangé dopée par 5000 ppm de propanoate d'éthyle).

En 2008, Herbinet *et al.* [22] développent un mécanisme cinétique détaillé d'oxydation du décanoate de méthyle comprenant 8555 réactions et 3036 espèces, incluant les réactions de basse température de n-heptane [23], de l'iso-octane [24] et du butanoate de méthyle (Fisher (2000)). Ce modèle a été comparé avec les résultats de l'oxydation des esters méthyliques d'huiles de colza. Le modèle reproduit convenablement la formation de CO, CO_2 et H_2O mais représente mal les profils des autres espèces.

Dayma *et al.*, en 2008 [25], étudient l'oxydation de l'hexanoate de méthyle en réacteur auto-agité à haute pression (10atm), dans un domaine de température comprise entre 500 et 1000 K et un temps de passage de 1s. Dans ces conditions, l'oxydation de l'hexanoate de méthyle présente les trois régimes d'oxydation des hydrocarbures (flamme froide, coefficient négatif de température et zone à haute température). Ils développent et valident leur modèle cinétique détaillé comprenant 1875 réactions réversibles et 435 espèces. Les analyses de voies réactionnelles montrent que l'oxydation de l'hexanoate de méthyle est contrôlée par la faible liaison C-H du carbone en position alpha par rapport à la fonction ester. Une année plus tard, en 2009, Dayma et al.. [26] publient une étude expérimentale et de modélisation portant sur l'oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm. Ils obtiennent les profils de concentration des réactifs, produits et intermédiaires principaux. Ils observent bien les trois régimes obtenus généralement lors de l'oxydation des hydrocarbures lourds. Ils proposent un modèle cinétique détaillé comportant 4592 réactions réversibles et 1087 espèces. Ce modèle qui est une extension de celui de l'hexanoate de méthyle reproduit assez bien les résultats expérimentaux.

En 2009, HadjAli *et al.* [27], ont mesuré des délais d'auto-inflammation d'une série d'esters méthyliques allant du butanoate de méthyle à l'heptanoate de méthyle en machine à compression rapide pour des pressions comprises entre 4 et 20 atm et des températures variant de 650 à 850 K. Ils ont étudié l'auto-inflammation et l'oxydation de l'hexanoate de méthyle qui présente une phénoménologie d'auto-inflammation en deux stades avec une flamme froide et une zone du coefficient négatif de température (CNT). Ils ont examiné le schéma réactionnel et la réactivité de cet ester, puis les ont comparés à ceux de plusieurs alcanes (n-butane, n-pentane et n-heptane) pour montrer l'impact de la fonction ester sur la réactivité de la chaîne alkyle.

En 2010 Hakka *et al* [28] mesurent les délais d'auto-inflammation en tube à choc du butanoate de méthyle et du butanoate d'éthyle entre 1250 et 2000 K pour des richesses de 0,25 à 2 et une pression de 8 atmosphères. Ils observent une réactivité plus importante du butanoate d'éthyle comparée à celle du butanoate de méthyle. Les analyses de vitesse et de sensibilité ont été effectuées et ont montré que cette différence de réactivité serait due aux réactions d'initiations

unimoléculaires produisant des radicaux et des atomes d'hydrogène. Ces auteurs ont également montré les voies de consommation des deux esters étaient complètement différentes, à savoir que le butanoate d'éthyle est consommé principalement par décomposition moléculaire alors que le butanoate de méthyle est lui consommé par des réactions de métathèse. Parallèlement, les auteurs ont aussi étudié en réacteur auto-agité le butanoate de méthyle entre 800 et 850 K. Diverses espèces intermédiaires et finales ont pu être identifiées et quantifiées notamment le crotonate de méthyle et l'acrylate de méthyle.

En 2009 Hakka *et al* [29] publient une étude en réacteur auto-agité portant sur l'oxydation de deux mélanges, à savoir n-décane/n-hexadécane et n-décane/palmitate de méthyle 74/26 (mole/mole) entre 550 et 1100 K, à pression atmosphérique et à un temps de passage de 1,5 s. La comparaison entre les résultats montre que la réactivité du palmitate de méthyle était très proche de celle du n-hexadécane. Par conséquent, le n-hexadécane pourrait être utilisé comme molécule modèle du palmitate de méthyle. Cependant, cette substitution ne serait plus valable lorsqu'il s'agirait de la quantification de certaines espèces spécifiques à l'oxydation du palmitate de méthyle.

Enfin, on peut également citer les travaux de Bax S *et al* en 2010 [30] qui ont étudié expérimentalement l'oxydation d'un mélange constitué de 26 % mol. d'oléate de méthyle ($C_{19}H_{36}O_2$), ester méthylique insaturé, et de 74 % mol. de n-décane ($C_{10}H_{22}$). Leurs expériences sont menées en réacteur auto-agité par jets gazeux entre 550 et 1100 K et à un temps de passage de 1,5 s. Ces travaux ont permis d'identifier et de quantifier plusieurs espèces présentant différentes fonctions chimiques parmi lesquelles on peut citer des composés diéniques, des esters méthyliques comportant deux insaturations, des aldéhydes conjugués à une double liaison. Par ailleurs, ces auteurs ont pu également comparer leurs résultats pour l'oxydation de l'oléate de méthyle à ceux du palmitate de méthyle précédemment étudié. Cette comparaison a montré que l'oléate de méthyle était légèrement plus réactif que le palmitate de méthyle dans la zone suivant le coefficient négatif de température vers 800 K et qu'en dehors de cette zone, les réactivités des deux esters méthyliques étaient similaires.

Le tableau II-1 résume une partie des travaux expérimentaux antérieurs portant sur l'oxydation des esters méthyliques disponibles dans la littérature.

Hydrocarbures	Dispositif exp.	Conditions exp.			Résultats	Référence
		T (K)	P (atm)	φ		
Acétate de méthyle	Réacteur auto-agité	800-1200	10	0,5-2	Profils d'espèces	Dagaut et al. (1997)
Butanoate de méthyle	Réacteur auto-agité	800-1350	1	1,13	Profils d'espèces	Gaïl et al. (2007)
	Flamme de diffusion à contre courant	500-900	1	0,35-1,5	Profils d'espèces	
	Réacteur à écoulement	500-900	12,66	0,35-1,5	Profils d'espèces	
Butanoate de méthyle	Tube à choc	1100-1670	1 et 4	0,25-1,5	Délai d'auto-inflammation	Metcalfe et al (2007)
Crotonoate de méthyle et butanoate de méthyle	Réacteur auto-agité	850-1400	1	0,375-0,750	Profils d'espèces	Gaïl et al. (2008)
Butanoate de méthyle	Tube à choc	1250-1760	1 et 4	0,25-1,5	Délai d'auto-inflammation	Dooley et al. (2008)
	Machine à compression rapide	640-949	10, 20, 40	0,33; 0,5 et 1		
Butanaote de méthyle et propanoate de méthyle	Machine à compression rapide	935-1117	4,7-19,6	0,3-0,4	Délai d'auto-inflammation	Walton et al. (2009)
RME	Réacteur auto-agité	800-1400	1	0,25-1,5	Profils d'espèces	Dagaut et al. (2007)
Décanoate de méthyle	Moteur		Taux de compression de l'indice d'octane réglable entre 4,00 et 13,75		Profils d'espèces	Szybist et al. (2007)
Nonanoate de méthyle, Nonoanoate d'éthyle, 2-Nonenoate de méthyle et 3-Nonenoate de méthyle	Moteur CFR		Taux de compression de l'indice d'octane réglable entre 4,43 et 15,00		Identification des espèces	Zhang et al. (2009)
Hexanoate d'éthyle et Heptanoate de méthyle	Moteur CFR		Taux de compression de l'indice d'octane réglable entre 4,43 et 15,00	0,25	Identification des espèces	Zhang et al. (2010)
Hexanoate de méthyle	Racteur auto-agité	500-1000	10	0,5-1,5	Profils d'espèces	Dayma et al. (2008)
Heptanoate de méthyle	Racteur auto-agité	560-1200	10	0,6-2	Profils d'espèces	Dayma et al. (2009)
Séries d'esters méthyliques allant du butanoate de méthyle à l'heptanoate de méthyle	Machine à compression rapide	650-850	4,0-20	1	Délai d'auto-inflammation	HadjAli et al. (2009)

Tableau II.1 : Résumé non exhaustif de l'état de l'art sur l'oxydation des esters méthyliques disponible dans la littérature

3. Etat de l'art sur l'oxydation des alcools

Dans ce paragraphe, nous présentons quelques travaux disponibles dans la littérature concernant

l'oxydation des alcools purs, et notamment ceux étudiés dans ce travail.

- **Le méthanol**

Envisagé comme carburant alternatif, le méthanol présente d'énormes avantages : faible émission de CO et d'hydrocarbures imbrûlés, faible formation de NOx et de suies. Il peut être produit à partir du gaz naturel, du charbon, de la biomasse (biométhanol, autrefois appelé alcool de bois). Cependant, il possède un inconvénient majeur qui est sa neurotoxicité. Le méthanol est également une espèce intermédiaire formée lors de la combustion des hydrocarbures et constitue de ce fait un élément très important dans l'établissement des modèles cinétiques.

Les premiers travaux sur le méthanol remontent à 1975 et portent sur l'auto-inflammation de ce composé en tube à choc [31]. Les auteurs ont mesuré les délais d'auto-inflammation du méthanol, délais définit comme étant le temps écoulé jusqu'à l'obtention des concentrations maximales de CO et O.

En 1979, Aronowitz *et al.* [32] ont étudié l'oxydation du méthanol en réacteur à écoulement à pression atmosphérique dans un large domaine de température 950-1030 K et de richesse 0,03-3,16. Ils ont développé un modèle « semi-global » pour décrire leurs résultats et conclu que le radical HO_2 est important pour l'oxydation du méthanol dans leurs conditions expérimentales.

En 1982, Cathonnet M *et al* [33]ont étudié en réacteur statique l'oxydation et l'auto-inflammation du méthanol dans le domaine de températures 773-873 K. Ils ont obtenu des profils de concentration en fonction du temps des principales espèces (CO, CO, CH_2O et H_2). Les auteurs ont établi un modèle cinétique pour simuler les résultats expérimentaux.

Une étude a été menée à Lille par Pauwels *et al* [34]sur l'oxydation d'une flamme laminaire et stoechiométrique de méthanol/air à basse pression. Le couplage analyse par résonance électronique-chromatographie en phase gazeuse a permis d'obtenir les profils en fonction de la distance au brûleur à la fois des atomes mais également des espèces moléculaires. La simulation de leurs résultats au moyen d'un mécanisme cinétique est en accord avec l'expérience.

Norton *et al.*, en 1989 [35], ont étudié l'oxydation du méthanol en réacteur à écoulement turbulent dans un domaine de température allant de 1025 K à 1090 K et de richesse variant de 0,6 à 1,6. Ces auteurs ont mesuré les espèces stables formées lors de l'oxydation du méthanol et ont démontré l'importance des radicaux HCO et CH_2OH dans la structure du mécanisme d'oxydation de ce composé.

Egolfopoulos *et al.* [36], en 1992, ont étudié la cinétique d'oxydation du méthanol en utilisant

diverses techniques (flamme, réacteur à écoulement, réacteur statique, tube à choc). Ils ont mesuré les vitesses de flamme des mélanges CH_3OH-air en milieu pauvre et riche à pression atmosphérique, la température comprise entre 298 K et 368 K.

Held et Dryer, en 1994 et 1998 [37], ont effectué des travaux expérimentaux et de modélisation sur l'oxydation du méthanol en réacteur à écoulement dans des conditions de pression comprises entre 1 et 20 atm, la température variant entre 750 K et 1100 K.

En 2001, Alzueta *et al.* [38]ont étudié l'effet du monoxyde d'azote, de la température et de la concentration de l'oxygène sur la combustion du méthanol en réacteur à écoulement à pression atmosphérique et la température variant entre 700 K et 1500 K.

Dagaut *et al.*, en 2005 [39], ont étudié l'oxydation du méthanol en réacteur auto-agité et ont proposé un mécanisme cinétique de sa combustion. Dayma *et al.* en 2007 [40] ont effectué une étude expérimentale et de modélisation de l'oxydation du méthanol. Ils ont étudié la sensibilisation de son oxydation par l'ajout de NO et NO_2.

- **L'éthanol**

L'éthanol est aujourd'hui le biocarburant le plus répandu et le plus utilisé dans le monde. Les études portant sur l'oxydation de l'éthanol sont nombreuses et variées avec divers dispositifs expérimentaux.

Norton et Dryer, en 1992 [41], ont étudié l'oxydation de l'éthanol en réacteur à écoulement à pression atmosphérique et température de 1100 K, la richesse variant de 0,61 à 1,24. Ils étaient les premiers à décrire l'évolution détaillée des produits d'oxydation de haute température de ce composé. Les espèces intermédiaires majoritaires identifiées sont l'acétaldéhyde, l'éthylène et le méthane.

En 1992 Dagaut *et al* [42] proposent un mécanisme de pyrolyse et de combustion de l'éthanol et le valident sur plusieurs dispositifs expérimentaux : réacteur auto-agité, réacteur à écoulement, tube à choc et brûleur. Par ailleurs, le même mécanisme permet de rendre compte de la combustion de l'hydrogène, du méthane, de l'éthane, de l'éthylène, du propène et du propane. L'accord entre les données expérimentales et les résultats des simulations est bon pour la plupart des espèces.

Marinov, en 1999 [43], a proposé également un mécanisme cinétique détaillé à haute température d'oxydation de l'éthanol et validé sur cinq différents systèmes : réacteur auto-agité, flamme, tube à choc, réacteur à écoulement turbulent.

En 2001, Li *et al.* [44] ont étudié la pyrolyse de l'éthanol en réacteur à écoulement à 950 K et variant la pression de 3 à 12 atm. La confrontation des résultats expérimentaux au modèle de Marinov a montré que le modèle sous-estime la consommation de l'éthanol et la formation de H_2O et de C_2H_4.

En 2004, Can *et al.* [45] ont réalisé en moteur une étude expérimentale sur l'effet de l'ajout de l'éthanol (10% et 15% en volume) dans les carburants de type gazole. Les résultats expérimentaux ont montré que l'ajout de l'éthanol réduit la formation de CO, suie et SO_2 mais augmente malheureusement l'émission de NOx, ce qui a été confirmé également par les travaux de Niven [46] en 2005 et de farrell [47] en 2006.

Plus récemment, en 2007, Saxena et Williams [48] ont effectué une étude expérimentale et de modélisation de l'éthanol en flamme. Les profils de concentration de plusieurs espèces ont été suivis (C_2H_5OH, CO, CO_2, H_2O, H_2, O_2, CH_4, C_2H_4, C_2H_2 et C_2H_6). Ces auteurs ont notamment développé un modèle qui prend en compte les voies de formation des NO_x.

- **L'isopropanol**

Il existe très peu d'étude sur l'oxydation de l'isopropanol dans la littérature contrairement au méthanol et à l'éthanol. Néanmoins, on peut citer les travaux de Norton et Dryer [41] en 1992. Ils étudient en réacteur à écoulement l'oxydation d'une série d'alcools dont l'isopropanol.

En 2009, Johnson *et al.* [49] étudient l'oxydation du n-propanol et de l'isopropanol en tube à choc entre 1350 et 2000 K sous une pression de 1 atm et à trois richesses (0,5, 1,0 et 2,0). Ils mesurent les délais d'auto-inflammation (définis à partir de la mesure de pression et de l'émission des radicaux CH*) des deux isomères. Ils observent l'effet de la richesse, de la température et de la concentration du mélange sur les délais d'auto-inflammation.

Kasper *et al.* en 2009 [50] publient une étude sur la structure d'une flamme plate prémélangée du mélange propanol/air à pression atmosphérique. Ils mesurent les profils de fractions molaires des produits, des principaux intermédiaires et des radicaux par spectrométrie de masse à faisceau moléculaire (MBMS).

En 2010, Frassoldati *et al.* [51] ont étudié expérimentalement et théoriquement l'oxydation du n-propanol et de l'isopropanol en flamme non prémélangée à contre courant.

- **Le butan-1-ol**

Le butan-1-ol a été également envisagé comme un carburant alternatif ([52], [53]) avec de

meilleures caractéristiques que l'éthanol [54] : une plus faible pression de vapeur (0,33 psi pour le 1-butanol contre 2 psi pour l'éthanol), un pouvoir calorifique plus élevée (26,9-27,0 MJ/l pour le 1-butanol et 21,1-21,7 MJ/l pour l'éthanol). Ainsi, la production de bio-butanol a fait l'objet de nombreuses publications [55], [56], [57], [58]). Cependant, les études concernant l'oxydation du butanol sont peu nombreuses.

Barnard [59] a étudié pour la première fois la pyrolyse du butan-1-ol en 1957. Ils ont mesuré la constante de la réaction entre 846 et 902 K, à pression atmosphérique et ont trouvé une valeur égale à $1,58 \times 10^{12} \exp(-28500/T)\ s^{-1}$.

Plus récemment, en 2005, McEnally et Pfefferle [60] ont étudié une flamme du mélange butanol/méthane/air non prémélangée à la stoechiométrie et pression atmosphérique des 4 isomères de butanol. Ces auteurs ont identifié deux voies principales de décomposition du n-butanol : d'une part l'élimination à quatre centres produisant de l'eau et du but-1-ène et d'autre part, la rupture d'une liaison C-C conduisant à la formation d'alcènes, d'aldéhydes et de cétones.

Yang *et al.* en 2007 [61], ont étudié la structure de flamme des isomères de butanol en milieu riche sur des flammes de prémélange.

En 2009, Dagaut *et al.* [62] ont réalisé une étude cinétique de l'oxydation du n-butanol à haute pression (10 atm), haute température (800-1150 K), la richesse variant entre 0,5 et 2 en réacteur auto-agité. Ils obtiennent les profils de concentration des réactifs, produits et intermédiaires principaux et identifient les espèces majoritaires suivantes : le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, l'hydrogène, le méthane, le formaldéhyde, l'éthylène et le propène. Des espèces en quantité moins importante telles que le butanal, le 1-butène, l'éthane, l'acétylène, l'acétaldéhyde ont été détectées. Ils proposent un modèle qui reproduit convenablement les résultats expérimentaux.

La même année, Sarathy *et al.* [63] publient une étude expérimentale associée d'une modélisation de l'oxydation du n-butanol en utilisant trois systèmes différents : les profils de concentration d'espèces sont obtenus en réacteur auto-agité à 1 et 10 atm et au moyen d'une flamme de diffusion à flux opposés, puis les vitesses de flamme sont obtenues à l'aide d'une bombe. Les résultats expérimentaux obtenus avec ces différents dispositifs ont permis de valider le modèle proposé comprenant 878 réactions et 118 espèces.

Moss *et al.* (2008) [64] ont mesuré les délais d'auto-inflammation en tube à choc de mélanges butanol (4 isomères)/oxygène/argon entre 1200 et 1800 K et pour des pressions variant de 1 à 4 bar. Les délais ont été déterminés en suivant l'émission des radicaux OH et en mesurant la pression. Ces auteurs ont développé et validé dans leurs conditions un modèle cinétique d'oxydation des 4

isomères : 1-butanol, 2-butanol, iso-butanol et le tert-butanol. Les analyses de sensibilité et de voies réactionnelles ont révélé l'importance des trois catégories de réactions (déshydratation, décomposition unimoléculaire et métathèse) dans la consommation du butanol.

Black *et al.* (2009) [65] publient aussi une étude expérimentale et théorique de l'oxydation du 1-butanol en tube à choc entre 1100 et 1800 K, à différentes pressions (1, 2,6 et 8 atm) et à trois richesses (0,5 1,0 et 2,0). Ils développent un modèle cinétique comprenant 1399 réactions et 234 espèces qu'ils valident aussi bien en tube à choc qu'en réacteur agité.

➢ Le pentan-1-ol et le hexan-1-ol

Le pentan-1-ol et le hexan-1-ol font partie des alcools « gras » utilisables à plus long terme. Jusqu'à présent, les études de l'oxydation de ces composés sont quasi inexistantes, mis à part les travaux en moteur réalisés par Gautam et Martin [66], Gautam *et al.* [53] en 2000. Ces auteurs observent que les alcools à masse molaire plus élevée mélangés à l'essence tendent à s'enflammer plus rapidement, ce qui constitue un avantage non négligeable.

Hydro-carbures	Dispositif exp.	Conditions exp.			Résultats	Référence
		T (K)	P (atm)	φ		
Méthanol	Réacteur à écoulement	950-1030	1	0,3-3,16	Profils d'espèces	Aronowitz et al. (1979)
Méthanol	Réacteur à écoulement	1025-1090		0,6-1,6	Profils d'espèces	Norton et al. (1992)
Méthanol	Réacteur à écoulement	750-1100	1,0-20		Profils d'espèces	Held et Dryer (1998)
Méthanol	Réacteur auto-agité	900-1450	1		Profils d'espèces	Dagaut et al. (2005)
Méthanol	Réacteur auto-agité	900-1450	1		Profils d'espèces	Dayma et al. (2007)
Ethanol	Réacteur à écoulement	1100	1	0,61-1,24	Profils d'espèces	Norton et Dryer
Ethanol	Réacteur à écoulement	950	3,0-12,0		Profils d'espèces	Li et al. (2001)
n-propanol et Isopropanol	tube à choc	1350-2000	1	0,5-2	Délais d'auto-inflammation	Johnson et al. (2009)
(1 et 2)-propanol	Brûleur		1		Identification d'espèces	Kasper et al. (2009)
n-propanol et Isopropanol	Brûleur	900-2000			Profils d'espèces	Frassoldati et al. (2010)
Butanol	Brûleur		1	1	Structure de flamme et profils d'espèces	McEnally et Pfefferie (2005)
Butanol	Réacteur auto-agité	800-1150	10	0,5-2	Profils d'espèces	Dagaur et al. (2008)
Butanol	Réacteur auto-agité	750-1300	1	0,25-2	Profils d'espèces	Sarathy et al. (2008)
	Brûleur			0,8-1,1	Structure de flamme	
4 isomères de Butanol	Tube à choc	1200-1800	1,0-4,0	0,25-1,0	Délais d'auto-inflammation	Moss et al. (2009)
1-Butanol	Tube à choc	1100-1800	1,0 2,6 et 8	0,5 1,0 et 2,0	Délais d'auto-inflammation	Black et al. (2009)

Tableau II-2 Récapitulatif non exhaustif des travaux disponibles dans la littérature sur l'oxydation des alcools

Conclusion

L'étude bibliographique montre que de nombreux travaux sont actuellement menés concernant l'oxydation des biocarburants. Cependant, on peut remarquer l'existence d'une grande disparité dans la répartition des études. Cette disparité se traduit par de nombreuses études sur l'oxydation des composés à faible masse molaire et un nombre relativement restreint de données sur les molécules à masse molaire élevée.

L'état de l'art sur la cinétique d'oxydation des esters méthyliques montre que le butanoate de méthyle a été largement étudié dans un grand domaine de pression et de température en comparaison avec ceux des esters méthyliques à masse molaire plus élevée.

L'état de l'art concernant l'oxydation des alcools montre que de nombreuses études ont été menées sur le méthanol et l'éthanol. Par contre, les études sur les alcools de masse plus élevée sont presque inexistantes.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. J. F. Griffiths

   Kinetic Fundamentals of Alkane Autoignition at Low Temperatures. Combustion and Flame,1993. **93**: p. 202-206.

2. J. F. Griffiths

   Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems. Progress in Energy and Combustion Science, 1995. **21** (1): p. 25-107.

3. T. J. Wallington, P. Dagaut, R. Liu, M. J. Kurylo

   The Gas-Phase Reactions of Hydroxyl Radicals with a Series of Esters over the Temperature-Range 240-440-K. International Journal of Chemical Kinetics, 1988. **20** (2): p. 177-186.

4. Lecalve, S., G. Lebras, and A. Mellouki

   Kinetic studies of OH reactions with a series of methyl esters. Journal of Physical Chemistry A, 1997. **101** (48): p. 9137-9141.

5. Dagaut, P., N. Smoucovit, and M. Cathonnet

   Methyl acetate oxidation in a JSR: Experimental and detailed kinetic modeling study. Combustion Science and Technology, 1997. **127**(1-6): p. 275-291.

6. P. Osswald, U. Struckmeier, T. Kasper, K. Kohse-Höinghaus, J. Wang, T. A. Cool, N. Hansen and P. R. Westmoreland

   Isomer-specific fuel destruction pathways in rich flames of methyl acetate and ethyl formate and consequences for the combustion chemistry of esters. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111** (19): p. 4093-4101.

7. E. M. Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook

   Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. Proceedings of the Combustion Institute, 2000. **28**: p. 1579-1586.

8. S. M. Sarathy, S. Gail, S. A. Syed, M. J. Thomson and P. Dagaut

   A comparison of saturated and unsaturated C-4 fatty acid methyl esters in an opposed flow diffusion flame and a jet stirred reactor. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**: p. 1015-1022.

9. S. Gail, M. J. Thomson, S. M. Sarathy, S. A. Syed, P. Dagaut, P. Diévart, A. J. Marchese and F. L. Dryer

   A wide-ranging kinetic modeling study of methyl butanoate combustion. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(1): p. 305-311.

10. S. Gail, S. M. Sarathy, M. J. Thomson, P. Diévart and P. Dagaut

Experimental and chemical kinetic modeling study of small methyl esters oxidation: Methyl (E)-2-butenoate and methyl butanoate. Combustion and Flame, 2008. **155**(4): p. 635-650.

11. W. K. Metcalfe, S. Dooley, H. J. Curran, J. M. Simmie, A. M. El-Nahas and M. V. Navarro

Experimental and modeling study of C5H10O2 ethyl and methyl esters. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111**(19): p. 4001-4014.

12. W. K. Metcalfe, C. Togbé, P. Dagaut, H. J. Curran and J. M. Simmie

A jet-stirred reactor and kinetic modeling study of ethyl propanoate oxidation. Combustion and Flame, 2009. **156** (1): p. 250-260.

13. S. Dooley, H.J. Curran and J.M. Simmie

Autoignition measurements and a validated kinetic model for the biodiesel surrogate, methyl butanoate. Combustion and Flame, 2008. **153** (1-2): p. 2-32.

14. A. Farooq, D. F. Davidson, R. K. Hanson, L. K. Huynh and A. Violi

An experimental and computational study of methyl ester decomposition pathways using shock tubes. Proceedings of the Combustion Institute, 2009. **32** (1): p. 247-253.

15. Walton, S.M., M.S. Wooldridge, and C.K. Westbrook

An experimental investigation of structural effects on the auto-ignition properties of two C5 esters. Proceedings of the Combustion Institute, 2009. **32** (1): p. 255-262.

16. 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. **31** (2): p. 2955-2961.

17. A. Ristori, P. Dagaut and M. Cathonnet

The oxidation of n-hexadecane: Experimental and detailed kinetic modeling. Combustion and Flame, 2001. **125** (3): p. 1128-1137.

18. P. Dagaut, A. El Bakali and A. Ristori,

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels. Fuel, 2006. **85**(7-8): p. 944-956.

19. J. P. Szybist, A. L. Boehman, D. C. Haworth, H. Koga

Premixed ignition behavior of alternative diesel fuel-relevant compounds in a motored engine experiment. Combustion and Flame, 2007. **149**(1-2): p. 112-128.

20. Y. Zhang, Y. Yang, and A.L. Boehman

Premixed ignition behavior of C9 fatty acid esters: A motored engine study. Combustion and Flame, 2009. **156**(6): p. 1202-1213.

21. W. R. Schwartz, C.S. McEnally, and L.D. Pfefferle

Decomposition and hydrocarbon growth processes for esters in non-premixed flames. Journal of Physical Chemistry A, 2006. **110**(21): p. 6643-6648.

22. O. Herbinet, W.J. Pitz and C.K. Westbrook

Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate. Combustion and Flame, 2008. **154** (3): p. 507-528.

23. H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook

A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation. Combustion and Flame, 1998. **114** (1-2): p. 149-177.

24. H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook

A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. Combustion and Flame, 2002. **129** (3): p. 253-280.

25. G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. Energy and Fuels, 2008. **22** (3): p. 1469-1479.

26. 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. **23** (9): p. 4254-4268.

27. K. HadjAli, M. Crochet, G. Vanhove, M. Ribaucour and R. Minetti

A study of the low temperature autoignition of methyl esters. Proceedings of the Combustion Institute, 2009. **32** (1): p. 239-246.

28. M. H. Hakka, H. Bennadji, J. Biet, M. Yahyaoui, B.Sirjean, V. Warth, L. Coniglio, O. Herbinet, P. A. Glaude, F. Billaud, F. Battin-Leclerc

Oxidation of methyl and ethyl butanoates. International Journal of Chemical Kinetics, 2009. **42** (4): p. 226-252.

29. M. H. Hakka, P.-A. Glaude, O. Herbinet and F. Battin-Leclerc

Experimental study of the oxidation of large surrogates for diesel and biodiesel fuels. Combustion and Flame, 2009. **156** (11): p. 2129-2144.

30. S. Bax, M. H. Hakka, P.-A. Glaude, O. Herbinet and F. Battin-Leclerc

Experimental study of the oxidation of methyl oleate in a jet-stirred reactor. Combustion and Flame. **157** (6): p. 1220-1229.

31. C. T. Bowman

Shock-Tube Investigation of High-Temperature Oxidation of Methanol. Combustion and Flame, 1975. **25** (3): p. 343-354.

32. D. Aronowitz, R. J. Santoro, F. L. Dryer and I. Glassman

Kinetics of the oxidation of methanol: Experimental results semi-global modeling and mechanistic concepts. Symposium (International) on Combustion, 1979. **17** (1): p. 633-644.

33. M. Cathonnet, J. C. Boettner and H. James

Study of methanol oxidation and self ignition in the temperature-range 500-600-deggees-C. Journal de Chimie Physique Et De Physico-Chimie Biologique, 1982. **79** (6): p. 475-478.

34. J.-F. Pauwels, M. Carlier, P. Devolder and L. R. Sochet

Experimental and Numerical Analysis of a Low Pressure Stoichiometric Methanol-Air Flame. Combustion Science and Technology, 1989. **64** (1): p. 97 - 117.

35. T. S. Norton and F.L. Dryer

Some New Observations on Methanol Oxidation Chemistry. Combustion Science and Technology, 1989. **63** (1-3): p. 107-129.

36. F. N. Egolfopoulos, D.X. Du and C.K. Law

A Comprehensive Study of Methanol Kinetics in Freely-Propagating and Burner-Stabilized Flames, Flow and Static Reactors, and Shock-Tubes. Combustion Science and Technology, 1992. **83** (1-3): p. 33-75.

37. T. J. Held and F.L. Dryer

A comprehensive mechanism for methanol oxidation. International Journal of Chemical Kinetics, 1998. **30**(11): p. 805-830.

38. M. U. Alzueta, R. Bilbao and M. Finestra,

Methanol oxidation and its interaction with nitric oxide. Energy and Fuels, 2001. **15** (3): p. 724-729.

39. P. Dagaut, O. Mathieu, A. Nicolle and G. Dayma

Experimental study and detailed kinetic modeling of the mutual sensitization of the oxidation of nitric oxide, ethylene, and ethane. Combustion Science and Technology, 2005. **177** (9): p. 1767-1791.

40. G. Dayma, K. Hadj Ali and P. Dagaut

Experimental and detailed kinetic modeling study of the high pressure oxidation of methanol sensitized by nitric oxide and nitrogen dioxide. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 411-418.

41. T. S. Norton, and F.L. Dryer

An Experimental and Modeling Study of Ethanol Oxidation-Kinetics in an Atmospheric-Pressure Flow Reactor. International Journal of Chemical Kinetics, 1992. **24** (4): p. 319-344.

42. P. Dagaut, J.C. Boettner and M. Cathonnet

Kinetic Modeling of Ethanol Pyrolysis and Combustion. Journal De Chimie Physique Et De Physico-Chimie Biologique, 1992. **89**(4): p. 867-884.

43. N. M. Marinov

A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation. International Journal of Chemical Kinetics, 1999. **31** (3): p. 183-220.

44. J. Li, A. Kazakov and F.L. Dryer

Ethanol pyrolysis experiments in a variable pressure flow reactor. International Journal of Chemical Kinetics, 2001. **33** (12): p. 859-867.

45. Ö. Can, I. Çelikten and N. Usta

Effects of ethanol addition on performance and emissions of a turbocharged indirect injection Diesel engine running at different injection pressures. Energy Conversion and Management, 2004. **45** (15-16): p. 2429-2440.

46. R. K. Niven

Ethanol in gasoline: environmental impacts and sustainability review article. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2005. **9** (6): p. 535-555.

47. A. E. Farrell, R. J. Plevin, B. T. Turner, A. D. Jones, M. O'Hare and D. M. Kammen

Ethanol can contribute to energy and environmental goals. Science, 2006. **311**(5760): p. 506-508.

48. P. Saxena and F.A. Williams

Numerical and experimental studies of ethanol flames. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 1149-1156.

49. M. V. Johnson, S. S. Goldsborough, Z Serinyel, P. O'Toole, E. Larkin, G. O'Malley and H. J. Curran

A Shock Tube Study of n- and iso-Propanol Ignition. Energy and Fuels, 2009. **23**: p. 5886-5898.

50. T. Kasper, P. Oβwald, U. Struckmeier, K. Koshe-Höinghaus, C. A. Taatjes, J. Wang, T. A. Coll, M. E. Law, A. Morel and P. R. Westmoreland

Combustion chemistry of the propanol isomers - investigated by electron ionization and VUV-photoionization molecular-beam mass spectrometry. Combustion and Flame, 2009. **156** (6): p. 1181-1201.

51. A. Frassoldati, A. Cuoci, T. Faravelli, U. Niemann, E. Ranzi, R. Seiser and K. Seshadri

An experimental and kinetic modeling study of n-propanol and iso-propanol combustion. Combustion and Flame, 2010. **157** (1): p. 2-16.

52. F. N. Alasfour

Butanol - A single cylinder engine study: Engine performance. International Journal of Energy Research, 1997. **21**(1): p. 21-30.

53. M. Gautam, D. Martin Ii and D. Carder

Emissions characteristics of higher alcohol/gasoline blends. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, 2000. **214**(2): p. 165-182.

54. Dupont, *http://www.dupont.com/*, http://www.dupont.com/.

55. Y. Tashiro, K. Takeda, K. Genta and K. Sonomoto

High production of acetone-butanol-ethanol with high cell density culture by cell-recycling and bleeding. Journal of Biotechnology, 2005. **120** (2): p. 197-206.

56. Y. Tashiro, H. Shinto, M. Hayashi, S.-I. Baba, G. Kobayashi and K. Sonomoto

Novel high-efficient butanol production from butyrate by non-growing Clostridium saccharoperbutylacetonicum N1-4 (ATCC 13564) with methyl viologen. Journal of Bioscience and Bioengineering, 2007. **104** (3): p. 238-240.

57. T. C. Ezeji, N. Qureshi and H.P. Blaschek

Bioproduction of butanol from biomass: from genes to bioreactors. Current Opinion in Biotechnology, 2007. **18** (3): p. 220-227.

58. N. Qureshi and I.S. Maddox

Continuous production of acetone-butanol-ethanol using immobilized cells of Clostridium acetobutylicum and integration with product removal by liquid-liquid extraction. Journal of Fermentation and Bioengineering, 1995. **80** (2): p. 185-189.

59. J. A. Barnard

The pyrolysis of n-butanol. Transactions of the Faraday Society, 1957. **53**(11): p. 1423-1430.

60. C. S. McEnally and L.D. Pfefferle

Fuel decomposition and hydrocarbon growth processes for oxygenated hydrocarbons: butyl alcohols. Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30**: p. 1363-1370.

61. B. Yang, P. Osswald, Y. Y. Li, J. Wang, L. X. Wei, Z. Y. Tian, F. Qi and K. Kohse-Höinghaus

Identification of combustion intermediates in isomeric fuel- rich premixed butanol-oxygen flames at low pressure. Combustion and Flame, 2007. **148** (4): p. 198-209.

62. 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. **32**: p. 229-237.

63. Sarathy, S.M., et al., *An experimental and kinetic modeling study of n-butanol combustion.* Combustion and Flame, 2009. **156** (4): p. 852-864.

64. J. T. Moss, A. M. Berkowitz, M. A. Oehlschlaeger, J. Biet, V. Warth, P.-A. Glaude, F. Battin-Leclerc

An Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of the Four Isomers of Butanol. The Journal of Physical Chemistry A, 2008. **112** (43): p. 10843-10855.

65. G. Black, H. J. Curran, S. Pichon, J. M. Simmie and V. Zhukov

Bio-butanol: Combustion properties and detailed chemical kinetic model. Combustion and Flame, 2010. **157** (2): p. 363-373.

66. M. Gautam, and D.W. Martin

Combustion characteristics of higher-alcohol/gasoline blends. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part a-Journal of Power and Energy, 2000. **214** (A5): p. 497-511.

III

Dispositif expérimental

Sommaire

III. Dispositif expérimental 57

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux 57

1.1. Principe des réacteurs parfaitement agités 57

1.2. Description du réacteur auto-agité 57

1.3. Calcul des débits gazeux 59

1.4. Prélèvement et échantillonnage des gaz de combustion 60

2. Analyse des gaz de combustion par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) 60

2.1. L'absorption infrarouge 60

2.2. Principe de l'analyse quantitative par infrarouge 61

2.3. Construction de la méthode de dosage en IRTF 61

3. Analyse des gaz de combustion par chromatographie en phase gazeuse (CPG) 63

3.1. Principe de la chromatographie en phase gazeuse 63

3.2. Analyse des composés hydrocarbonés 64

3.3. Analyse de l'hydrogène 64

3.4. Comparaison des mesures de CPG et de IRTF 64

4. Estimation de l'incertitude sur les résultats 65

III. Dispositif expérimental

Différents dispositifs expérimentaux sont disponibles pour étudier la combustion des hydrocarbures. Nous distinguons les brûleurs (à flamme de prémélange, à flamme de diffusion, à contre courant), les systèmes à compression (les tubes à choc, les machines à compression rapide), les réacteurs (fermés, à écoulement tubulaire, parfaitement agité). Pour notre étude, le dispositif expérimental utilisé est le réacteur auto-agité par jets gazeux (JSR, Jet Stirred Reactor).

1. Le réacteur auto-agité par jets gazeux

1.1. Principe des réacteurs parfaitement agités

Un réacteur parfaitement agité est un système qui permet d'étudier convenablement les mécanismes d'oxydation des hydrocarbures en fonction de la température, de la richesse et du temps de passage des gaz dans le réacteur. Il s'agit d'une enceinte à volume constant dans lequel on injecte le mélange combustible et comburant. Dans cette enceinte, la pression et la température sont constantes et la vitesse de mélange des réactifs est très rapide par rapport au temps de passage des gaz dans le réacteur. Par conséquent, les concentrations sont uniformes en tout point du système et la vitesse de conversion des réactifs en produits est contrôlée uniquement par les processus chimiques.

1.2. Description du réacteur auto-agité

Le réacteur (figure III-1) utilisé a été mis au point par Dagaut *et al*. [1] et est inspiré des travaux de Matras, David et Villermaux [2,3] qui ont défini les conditions de réalisation et de fonctionnement d'un réacteur auto-agité par jets gazeux. Le réacteur ainsi construit à l'ICARE est parfaitement agité avec un temps de passage pouvant varier de quelques millisecondes à quelques secondes.

La figure III-2 montre une photo de la zone réactionnelle du réacteur. C'est une sphère de faible volume (29,5 cm^3). Il est construit en silice fondue transparente (quartz) afin de limiter les réactions aux parois. Dans la demi-sphère haute du réacteur, se trouvent 4 injecteurs avec un diamètre de sortie de 1 mm. Ces injecteurs sont opposés deux à deux, assurant ainsi une bonne homogénéisation du mélange réactionnel. La disposition pyramidale des injecteurs permet le déplacement d'une sonde de prélèvement et d'un thermocouple le long de l'axe vertical du réacteur. Ceci permet de vérifier l'homogénéité en température et concentration du mélange gazeux pendant toute l'expérience. Le réacteur placé dans un four (deux éléments chauffants) permet d'étudier la cinétique de réactions jusqu'à 1400 K. L'ensemble réacteur-four est lui-même placé dans une enceinte métallique pressurisable permettant de travailler ainsi jusqu'à 10 atmosphères. La température à l'intérieure du réacteur est mesurée grâce à un thermocouple Pt/Pt-Rh 10%. Il est inséré à l'intérieur d'une fine gaine de quartz pour éviter des réactions catalytiques en surface. Les fils sont électriquement isolés grâce à un capillaire en quartz. Les profils de température relevés montrent que la variation en température dans le réacteur ne dépasse généralement pas 5 K.

Le carburant étudié, initialement sous forme liquide, est acheminé grâce à une pompe HPLC (High Performance Liquid Chromatography) jusqu'à un ensemble atomiseur-vaporisateur. A ce niveau, le carburant est dans un premier temps atomisé grâce à un flux d'azote (azote auxiliaire), ce mélange est ensuite vaporisé par chauffage dans la chambre de vaporisation. Ce flux gazeux constitué d'azote et de carburant est ensuite acheminé par l'intermédiaire d'un capillaire en quartz à l'entrée du réacteur. A l'entrée du réacteur, le flux gazeux azote-carburant va rencontrer un flux d'azote principal-oxygène, acheminé à l'extérieur du capillaire pour éviter toute réaction prématurée avant le réacteur. Les flux de gaz (azote et oxygène) sont préchauffés et régulés à l'aide de débitmètres massiques.

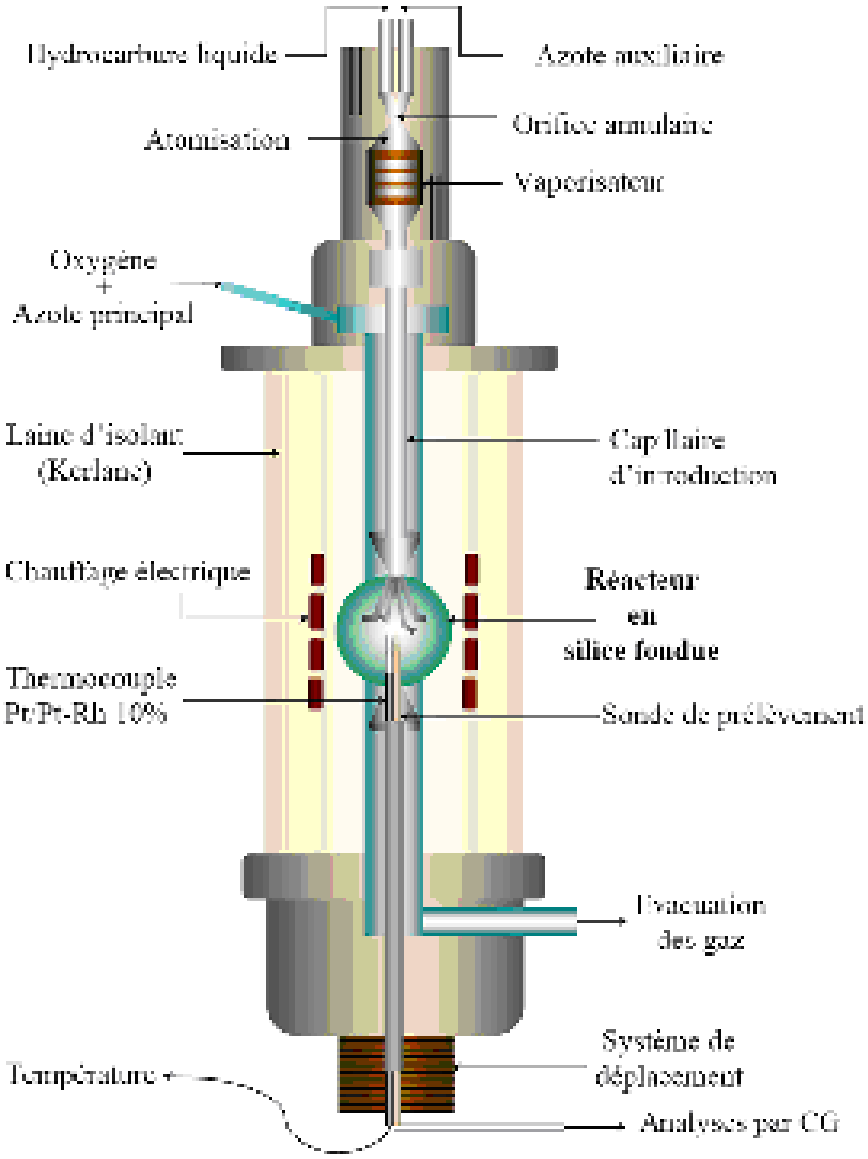


Figure III-1 : Schéma du réacteur auto-agité par jets gazeux

Figure III-2 : Photo de la chambre réactionnelle

1.3. Calcul des débits gazeux

Le réacteur auto-agité permet de travailler dans deux configurations possibles :

- à température constante et temps de passage variable
- à temps de passage constant et température variable

Toutes nos expériences sont réalisées à temps de passage constant et seuls les débits de réactifs et la température du réacteur (consigne du chauffage des fours) sont changés. Le calcul des débits gazeux est effectué à partir de l'expression du temps de passage τ (s) déterminée au moyen de la relation reliant volume du réacteur V_r (cm^3), débit gazeux total à l'entrée du réacteur D_t (cm^3/s), pression de travail P (atm), pression ambiante P_0 (atm), température de travail T (K), et température ambiante T_0 (K) [4] :

$$\tau = \frac{V_r}{D_t}(\frac{T_o}{T})(\frac{P}{P_o})$$

A partir de cette équation et connaissant la composition initiale du mélange étudié, la température et la pression étant fixées par l'expérimentateur, il est aisé de calculer les débits gazeux pour chaque constituant i d'après l'équation suivante :

$$D_i = X_i D_t = X_i(\frac{T_o}{T})(\frac{V_r}{\tau})$$

L'hydrocarbure étant introduit sous forme liquide, il est donc nécessaire de déterminer son débit liquide. L'expression du débit liquide calculée à partir de celle du débit gazeux s'écrit alors :

$$D_{HC} = X_{HC,i}(\frac{P}{T})(\frac{V_r}{\tau})(\frac{M_{HC}}{\rho_{HC} \times 22{,}414})$$

Avec M_{HC} masse molaire de l'hydrocarbure (g.mol^{-1})

ρ_{HC} masse volumique (g.cm^{-3})

Les débits sont contrôlés au cours des expériences par des débitmètres massiques pour les gaz (azote et oxygène) et par une pompe HPLC pour les carburants.

1.4. Prélèvement et échantillonnage des gaz de combustion

La mesure des concentrations dans un système réactif gazeux est précise si les réactions en cours à l'intérieur du réacteur sont figées. Ce figeage est obtenu au moyen d'une sonde sonique en quartz. Cette sonde sonique mobile nous permet de faire des prélèvements selon l'axe vertical du réacteur. Elle est reliée à une rampe de prélèvement via une ligne de transfert chauffée à une température supérieure à la température d'ébullition du carburant étudié. La totalité de ce circuit est maintenu sous vide à l'aide d'une pompe à palettes sans perturber les réactions dans le réacteur. Lors du prélèvement, le pompage est arrêté, ce qui nous permet d'introduire l'échantillon de gaz de combustion (200 millibars) dans la cellule à gaz du spectromètre infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) qui est directement reliée à la ligne de transfert. Par une autre ligne en téflon, l'échantillon est également stocké dans des ballons en Pyrex à température ambiante pour être analysé ultérieurement par chromatographie gazeuse. L'échantillonnage dans les ballons est réalisé à une pression voisine de 40 torrs, ce qui permet d'assurer un figeage des réactions et par conséquent d'assurer que l'échantillon prélevé est représentatif de la composition des gaz dans le réacteur.

2. Analyse des gaz de combustion par spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF)

2.1. L'absorption infrarouge

La spectrométrie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) est une technique d'analyse basée sur l'absorption du rayonnement infrarouge par les gaz à analyser. Elle permet via la détection des niveaux énergétiques roto-vibrationnels des molécules, d'identifier et de quantifier les espèces présentes dans les gaz. La fréquence des radiations absorbées dépend de la fréquence propre de vibration de la molécule. L'intensité d'absorption dépend de la variation du moment dipolaire. Par conséquent, seules les liaisons polarisées absorbent dans l'infrarouge. Les atomes et les molécules diatomiques symétriques (H_2, O_2, N_2, …) sont transparents et donc indétectables par cette technique.

2.2. Principe de l'analyse quantitative par infrarouge

La loi la plus simple d'absorption de l'intensité lumineuse par une substance dans un quelconque domaine spectroscopique est la loi de Beer-Lambert. Grâce à cette loi, la mesure de l'absorbance à une longueur d'onde λ permet de déterminer la concentration d'un composé. Cette relation entre l'absorbance d'un échantillon et sa concentration s'écrit :

$$A_\lambda = -\log \frac{1}{T_\lambda} = \varepsilon_\lambda \times l \times C$$

Avec A_λ absorbance à la longueur d'onde λ

T_λ transmittance à la longueur d'onde λ

ε_λ coefficient d'extinction molaire à la longueur d'onde λ

C concentration molaire

l longueur du chemin optique dans l'échantillon à analyser (l = 10 m)

2.3. Construction de la méthode de dosage en IRTF

Nous avons établi une méthode pour identifier et quantifier les espèces contenues dans le gaz de combustion en sortie du réacteur. L'établissement de la méthode d'analyse se déroule en plusieurs étapes énumérées ci-dessus :

- Acquisition d'un spectre de référence obtenu à partir d'un étalon pour chacun des composés à analyser. Sur la figure III-3, sont présentés des spectres d'étalons.
- Repérage des bandes d'absorption caractéristiques de chacun des composés
- Identification et signalisation des zones d'interférences entre composés (zones communes d'absorption entre deux ou plusieurs espèces). Le tableau III-1 présente les régions d'analyse (S) et d'interférence (I) pour chaque espèce dosée.
- Etablissement d'une courbe d'étalonnage à la pression de prélèvement pour chaque composé à analyser.

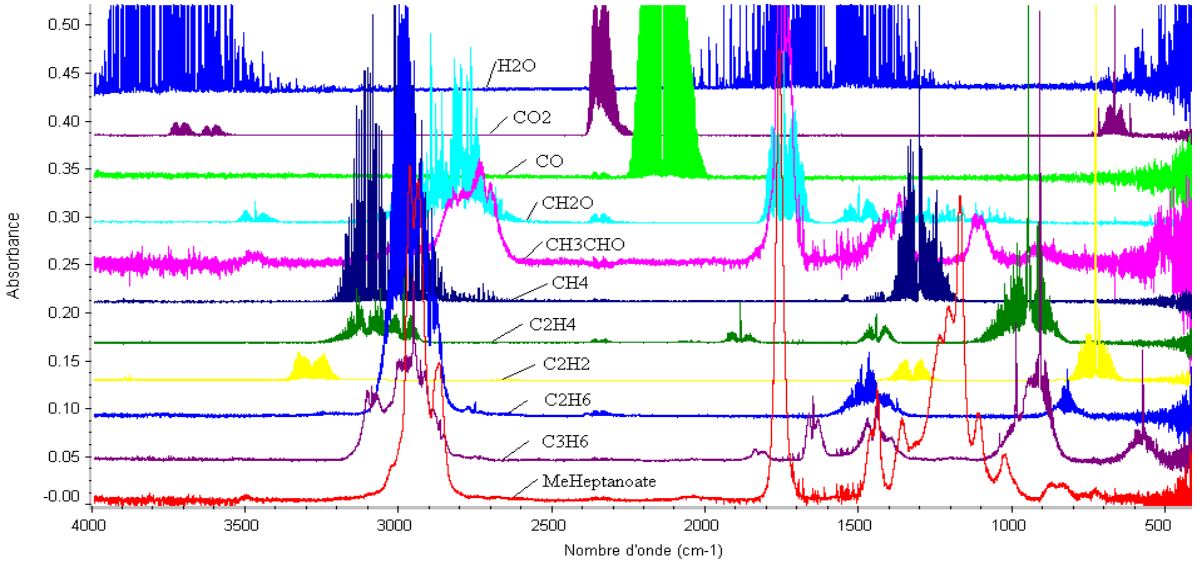


Figure III-3 Détermination des régions d'analyses (S) à partir des étalons.

	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) et leurs interférences (I)

Les nombres d'onde compris entre 4000 cm^{-1} et 500 cm^{-1} nous permettent de visualiser les principales espèces présentes dans les gaz en sortie du réacteur. Grâce à la méthode d'analyse construite ici, nous pouvons connaître la contribution de chaque espèce par rapport à des spectres étalons, et par conséquent déterminer leur concentration. Les espèces dosées par IRTF lors de nos expériences sont : H_2O, CO_2, CO, CH_2O, CH_3OH, CH_4, C_2H_6, C_2H_2, C_2H_4, C_3H_6. La figure III-4 nous montre un exemple de spectre dans le cas où le réactif est l'heptanoate de méthyle (MHEP).

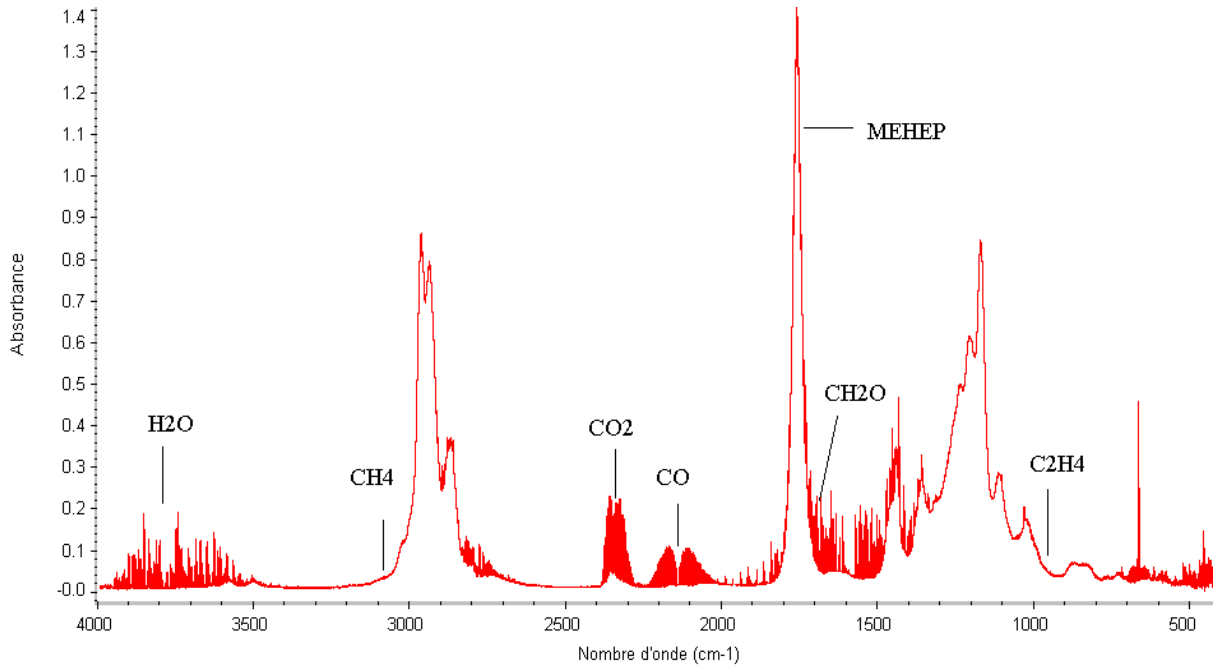


Figure III-4 Exemple de spectres obtenus en IRTF lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle à 620 K

Comme on peut le remarquer sur la figure III-3, les hydrocarbures d'une même famille ont des spectres d'absorptions similaires. Pour cela, nous avons également analysé les échantillons par chromatographie en phase gazeuse.

3. Analyse des gaz de combustion par chromatographie en phase gazeuse (CPG)

Les gaz de combustion prélevés dans des ballons en Pyrex au cours des expériences sont analysés par chromatographie en phase gazeuse. Les différents chromatographes utilisés sont équipés de différentes colonnes et détecteurs. Les caractéristiques (colonne, débit, etc.) des chromatographes utilisés sont présentées dans l'annexe 1. Ces chromatographes permettent ainsi d'identifier et de quantifier une large gamme d'espèces.

3.1. Principe de la chromatographie en phase gazeuse

La chromatographie en phase gazeuse est une technique d'analyse qui permet la séparation des espèces chimiques selon leur affinité respective entre la phase mobile (gaz vecteur) et la phase stationnaire (colonne). En fonction de la programmation de température, les molécules parcourent la colonne en un temps caractéristique, appelé temps de rétention.

Les différents chromatographes sont étalonnés par des étalons préparés manuellement à partir des composés purs ou des étalons commerciaux. Les espèces pour lesquelles nous ne disposons pas d'étalons, sont quantifiées en calculant un coefficient de réponse déterminé à partir de la règle du nombre de carbone effectif (ECN) [5] et des coefficients de réponse de composés de structure chimique voisine. Ceci nous permet ainsi d'identifier et de quantifier une large fraction des constituants d'un mélange. Il est à noter que les gaz à analyser sont d'abord comprimés à l'aide d'un piston chauffé en verre jusqu'à 750 torr avant d'être injectés dans les chromatographes. Cette

compression permet une meilleure détection des espèces.

3.2. Analyse des composés hydrocarbonés

Les espèces intermédiaires de combustion sont analysées et dosées sur deux chromatographes différents équipés d'un détecteur à ionisation de flamme (FID). Le premier chromatographe (n°1), équipé d'une colonne CP-Al_2O_3/KCl permet de détecter les hydrocarbures légers, c'est-à-dire ceux contenant moins de sept atomes de carbone. Le deuxième chromatographe (n°2) équipé d'une colonne DB624 nous permet de détecter tous les hydrocarbures (légers et lourds) et les composés oxygénés. Ce dernier chromatographe, couplé à un spectromètre de masse (MS) permet d'identifier certains composés lourds et oxygénés. Le gaz vecteur utilisé pour les deux chromatographes est l'hélium.

3.3. Analyse de l'hydrogène

L'hydrogène est dosé au moyen d'un chromatographe en phase gazeuse (n°3) équipé d'une colonne Carboplot P7 et d'un détecteur à conductibilité thermique (TCD). Le gaz vecteur utilisé est l'azote du fait que la conductivité thermique de l'hydrogène est proche de celle de l'hélium.

3.4. Comparaison des mesures de CPG et de IRTF

La figure III-5 présente une comparaison des fractions molaires de méthane et d'éthylène quantifiées grâce aux deux techniques d'analyses utilisées (IRTF et CPG) lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur pour φ=1. On constate que les quantités de méthane et d'éthylène déterminées avec ces deux techniques sont très proches.

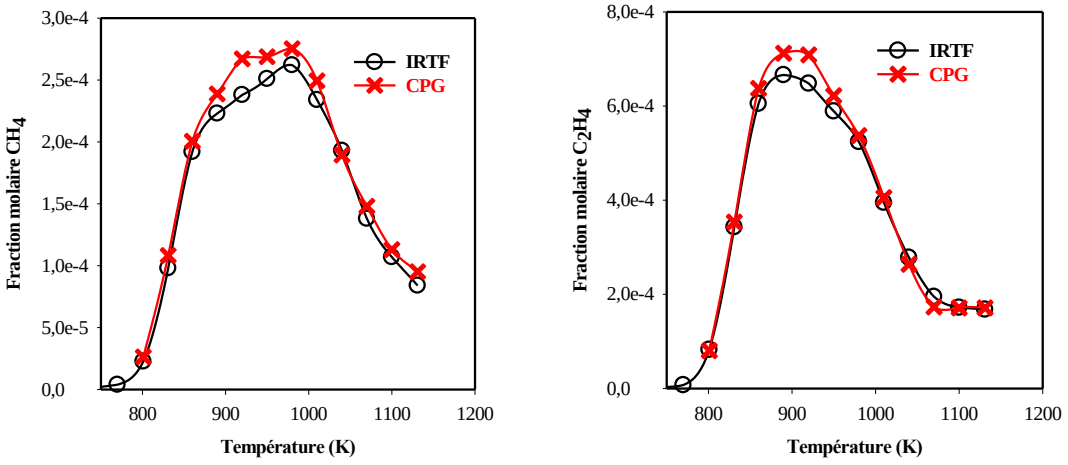


Figure III-5 : Comparaison des fractions molaires de méthane (CH_4) et d'éthylène (C_2H_4) mesurées par IRTF et CPG lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle à φ=1

4. Estimation de l'incertitude sur les résultats

La validation de modèles cinétiques détaillés est tributaire des résultats expérimentaux ; il est donc utile d'évaluer l'incertitude associée à ces résultats pour pouvoir relativiser la précision des modèles. Dans notre cas, le dispositif expérimental et le système analytique sont les principales sources pouvant être à l'origine des incertitudes sur les données expérimentales.

A la vue de tous les éléments constituants le dispositif expérimental, on peut déjà remarquer que la composition réelle du mélange gazeux introduit dans le réacteur dépend des débits imposés en azote, oxygène et hydrocarbure. Malgré toutes les précautions prises (étalonnage des débitmètres, précision des dispositifs de contrôle, etc.) il est difficile d'appliquer de manière très précise les débits théoriques pour obtenir la composition initialement souhaitée. De plus la conversion des débits en tensions de consigne peut être entachée d'erreur. Sur la figure III-6, sont représentées des courbes d'étalonnage des débitmètres d'O_2 et de N_2.

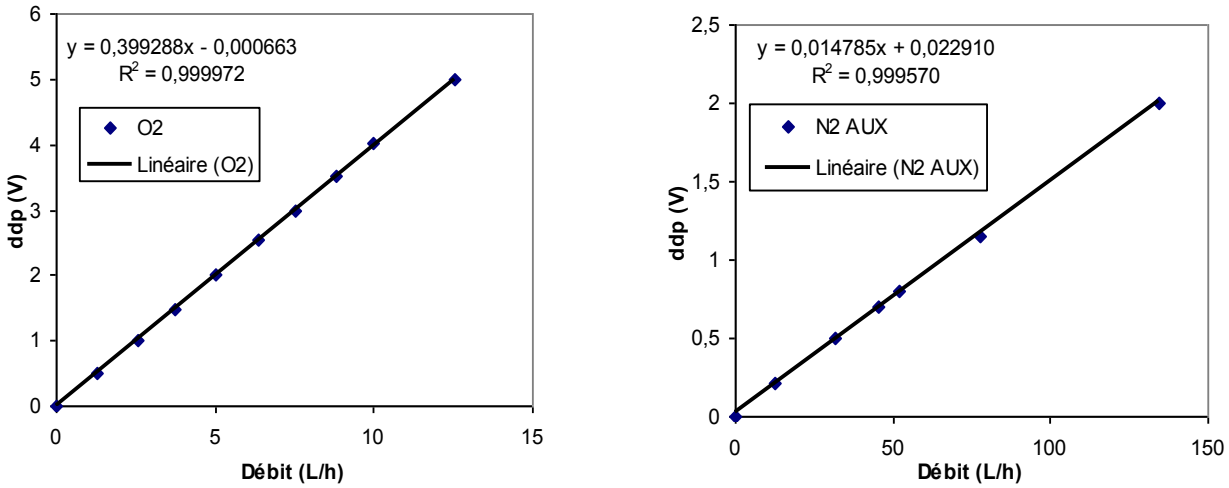


Figure III-6 Exemples de courbes d'étalonnage des débitmètres

La deuxième source d'erreur concerne les systèmes d'analyse utilisés (IRTF et CPG). Plusieurs facteurs peuvent être mis en cause dans ce cas : existence d'erreur sur les coefficients de réponse, incertitude sur les étalons et la pression d'injection des gaz, séparation difficile de certains pics malgré un choix de programmations de température adaptées rendant l'intégration des pics plus délicats. Les courbes d'étalonnage sont établies dans les conditions d'analyse en faisant varier la concentration du composé à analyser (cf. figure III-7).

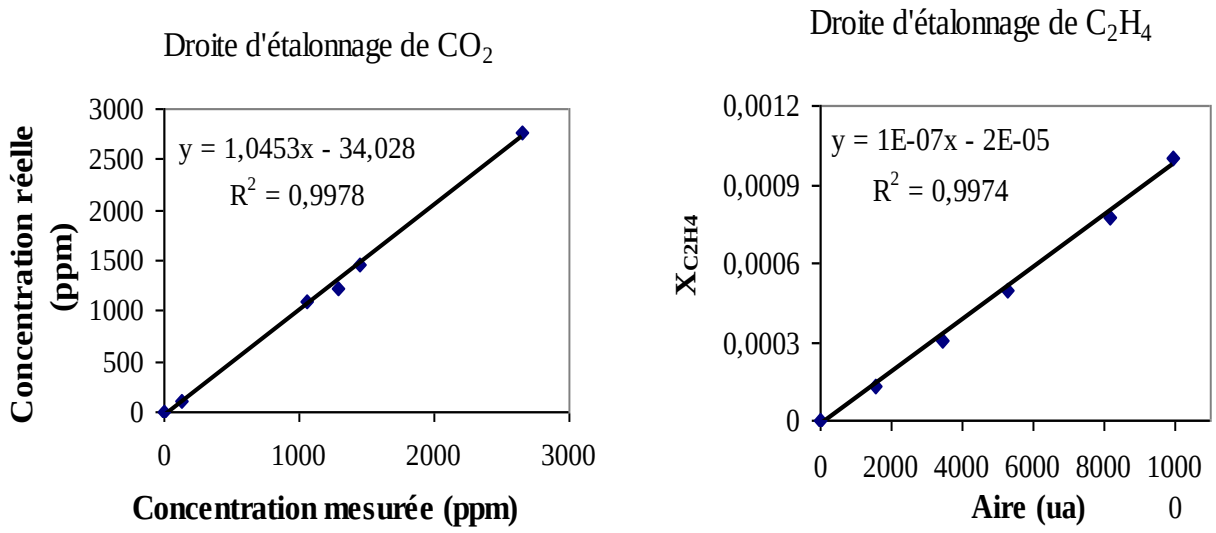


Figure III-7 Exemples de courbes d'étalonnage en IRTF (CO_2) et en CPG (C_2H_4)

En tenant compte de tous ces paramètres, on peut estimer l'incertitude globale sur les résultats expérimentaux égale au maximum à 15%.

Enfin, on estime que la variation de la température ne dépasse pas 5 K dans l'ensemble du réacteur.

Conclusion

Le réacteur auto-agité par jets gazeux constitue un système efficace pour l'étude de la cinétique de réactions dans le domaine de la combustion. Il présente des caractéristiques intéressantes (réactions aux parois limitées, fonctionnement à température ou temps de passage constants) et permet de travailler dans des conditions où le mélange réactionnel est homogène en composition et en température. Grâce au système de prélèvement disponible, les échantillons sont prélevés et analysés à l'aide de deux techniques, la chromatographie en phase gazeuse et l'infrarouge à transformée de Fourier.

Les résultats obtenus peuvent ensuite être utilisés pour la validation de modèles cinétiques adaptés aux composés étudiés.

REFERENCES 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. **19**(3): p. 207-209.

2. R. David et D. Matras

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

3. 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 28, 129.

4. J. Villermaux

   Réacteurs chimiques, Techniques de l'ingénieur

5. J. Tranchant

   Manuel de chromatographie en phase gazeuse, Masson, 1982

IV

Modélisation

Sommaire

IV. Modélisation....73

1. Les outils de calcul....73

1.1. Le logiciel CHEMKIN....73

1.2. Le mécanisme réactionnel (fichier chem.inp)....75

1.3. Les données thermodynamiques (fichier therm.dat)....75

1.4. Le code de calcul PSR....76

2. Construction des mécanismes cinétiques....78

2.1. Démarche générale de modélisation....78

2.2. Description générale du mécanisme d'oxydation des esters méthyliques étudiés....79

2.3. Règles de nomenclature....80

2.4. Base C_0-C_4....80

2.5. Construction des différents sous-mécanismes....81

2.6. Description générale du mécanisme d'oxydation des alcools étudiés....85

IV. Modélisation

Dans ce chapitre nous présenterons dans un premier temps les outils CHEMKIN utilisés pour la simulation des résultats expérimentaux obtenus au cours de cette étude. Puis, dans une deuxième partie, nous décrirons le mécanisme général utilisé pour les simulations.

1. Les outils de calcul

1.1.Le logiciel CHEMKIN

Lors de cette étude, la modélisation des réactions chimiques se déroulant dans le réacteur auto-agité a été réalisée au moyen du programme PSR [1] contenu dans la bibliothèque du logiciel CHEMKIN II (Kee et al.) [2]. Ce logiciel a été développé par les Laboratoires Sandia de Livermore dans les années 1980. Il permet d'interpréter le mécanisme élaboré qui se présente sous la forme de deux fichiers. Dans le premier fichier, encore appelé fichier chem.inp, sont introduites toutes les réactions chimiques et leurs constantes de vitesse constituant le mécanisme cinétique. Le deuxième fichier (therm.dat) contient les données thermodynamiques de toutes les espèces déclarées dans le mécanisme réactionnel (chem.inp). En se basant sur le contenu des deux fichiers, le logiciel CHEMKIN II lit les données thermodynamiques de chaque espèce, les réactions chimiques et leurs paramètres cinétiques. Ce programme vérifie ensuite la balance atomique de ces réactions chimiques, calcule les constantes de vitesse inverses à partir de la constante d'équilibre et génère finalement un fichier de liaison binaire (chem.bin). Ce dernier fichier généré est ensuite utilisé par le code de calcul PSR.

Ce code de calcul permet de résoudre les équations de conservation de matière et d'énergie propres au réacteur auto-agité. Les résultats de modélisation de ce code (PSR) sont regroupés dans des fichiers de sortie (binaire et texte). Ces fichiers contiennent toutes les informations relatives aux espèces mises en jeu et demandées par l'utilisateur (fractions molaires, vitesse de consommation et de formation, analyse de sensibilité). La figure ci-dessous montre les différents liens entre les fichiers.

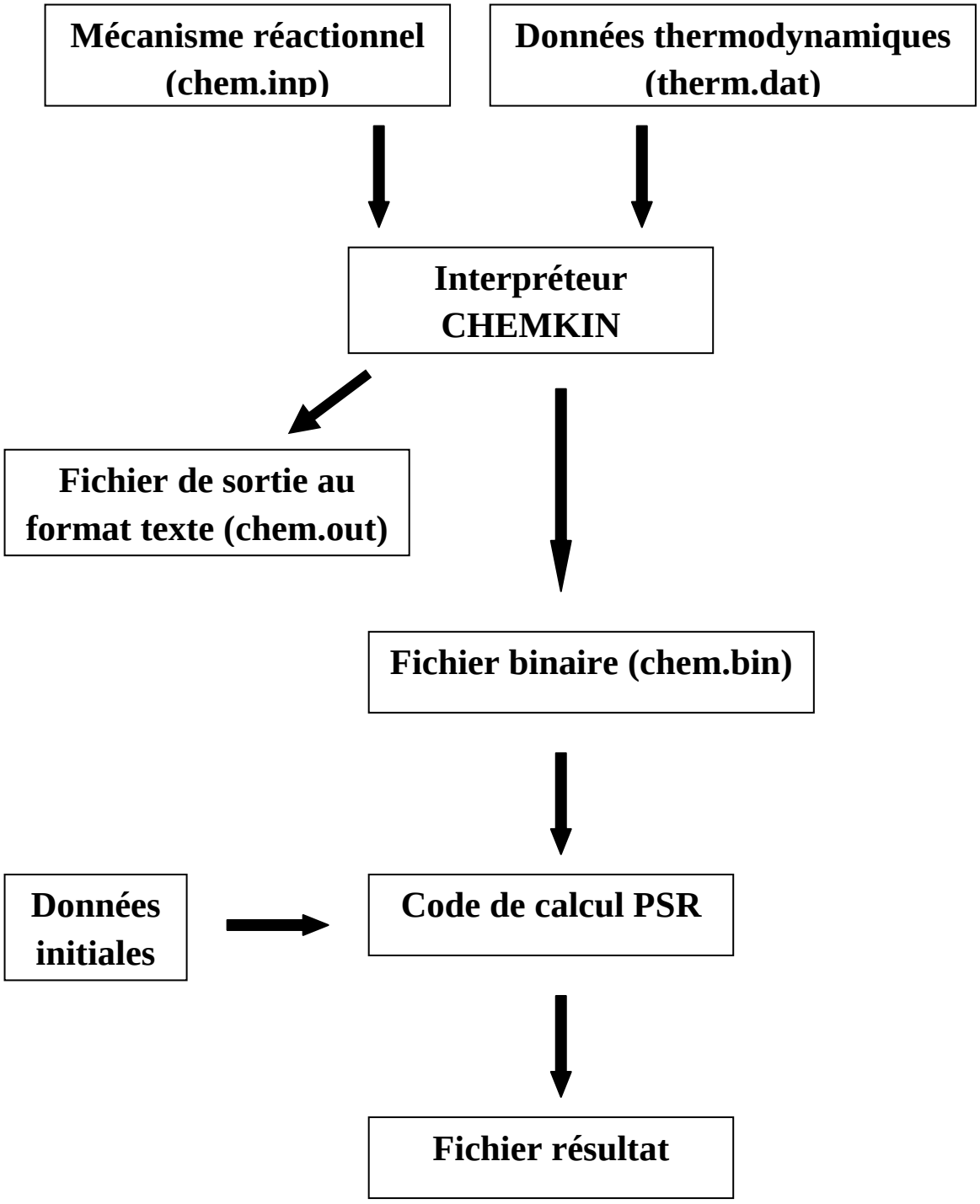


Figure IV-1 Architecture du package CHEMKIN

1.2.Le mécanisme réactionnel (fichier chem.inp)

Ce fichier se divise en trois parties qui contiennent toutes des informations indispensables à l'interprétation du mécanisme par le logiciel CHEMKIN. Dans la première partie, sont déclarés les différents éléments chimiques (atomes) qui interviennent dans le mécanisme. Dans la deuxième partie, sont indiquées toutes les espèces qui interviennent dans le mécanisme. Enfin, la dernière partie rassemble l'ensemble des réactions décrivant les étapes de transformation des réactifs en produits. Ces réactions peuvent être prises en compte de manière réversible ou irréversible. A la suite d'une réaction, est indiquée sa constante de vitesse, qui est écrite sous la forme de 3 coefficients : A, n et E. Chaque coefficient correspond à un paramètre de l'équation d'Arrhénius modifiée, exprimée par :

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

Avec A facteur préexponentiel (en s^{-1} pour les réactions unimoléculaires)

n coefficient correctif de variation du facteur préexponentiel avec la température

E énergie d'activation ($cal.mol^{-1}$)

T température (K)

R constante des gaz parfaits ($cal.K^{-1}.mol^{-1}$)

1.3.Les données thermodynamiques (fichier therm.dat)

Les données thermodynamiques des différentes espèces mises en jeu dans le mécanisme réactionnel sont écrites sous forme de polynômes développés par une équipe de la NASA (Gordon, Mc Bride) [3]. Ces coefficients permettent de calculer la capacité calorifique à pression constante (Cp), l'enthalpie (H) et l'entropie (S). Le format NASA introduit deux séries de sept coefficients permettant de calculer les propriétés thermodynamiques dans deux domaines de température distincts : le premier domaine compris en général entre 1000 et 5000 K et le deuxième entre 300 et 1000 K. Les données thermodynamiques sont donc déterminées à partir des relations suivantes :

$$\frac{C_{P,k}^{\circ}}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T_k + a_{3,k}T_k^2 + a_{4,k}T_k^3 + a_{5,k}T_k^4$$

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

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

Dans cette étude, lorsque les données thermodynamiques des espèces n'étaient pas disponibles dans la littérature, elles ont été calculées à l'aide du logiciel Thergas [4], qui utilise la théorie d'additivité des groupes ou de liaisons proposée par Benson [5].

1.4.Le code de calcul PSR

Le code de calcul PSR, développé par Glarborg *et al* [1] permet de modéliser les résultats obtenus en réacteur auto-agité. En effet, PSR résout les différentes équations de conservation de la matière et de l'énergie, deux principes qui régissent le fonctionnement des réacteurs parfaitement agité. Cependant, dans notre configuration, la température étant fixée, l'équation de conservation de l'énergie n'a pas à être résolue.

- Equations du réacteur auto-agité

Le réacteur est caractérisé par le volume V, le temps de passage τ, le flux massique $\dot{m}$ et la fraction massique Y_k de l'espèce k. Le débit massique est considéré constant.

Le temps de passage s'exprime en fonction du volume V, du flux massique $\dot{m}$ et de la masse volumique ρ, par :

$$\tau = \rho \frac{V}{\dot{m}} \qquad \text{avec} \qquad \rho = \frac{P\bar{M}}{RT}$$

Le réacteur parfaitement agité est une enceinte thermiquement isolée dans laquelle un flux stationnaire prémélangé de réactifs est introduit. Le système réactionnel fortement turbulent, assure l'homogénéité en température et en composition de l'ensemble du réacteur. Dans ces conditions, le réacteur fonctionne en régime stationnaire et les principes qui régissent son fonctionnement sont la conservation de la masse et de l'énergie, exprimées par :

Conservation de la masse $\dot{m}(Y_{k,S} - Y_{k,E}) - \dot{\omega}_k M_k V = 0$

Conservation de l'énergie $\dot{m}\sum_{k=1}^{K}(Y_{k,S}h_{k,S} - Y_{k,E}h_{k,E}) + Q = 0$

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

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

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

M_k : la masse molaire de l'espèce k

Q : perte thermique du réacteur

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

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

Les équations de conservations de la masse et de l'énergie décrivent un système de K+1 équations algébriques non linéaires dont les solutions sont les fractions massiques et la température.

La résolution de ce système nécessite la connaissance des paramètres suivants :

- les concentrations initiales des réactifs
- le temps de passage
- la pression dans le réacteur

❖ Résolution du système d'équations

Le système de K+1 équations est résolu par la méthode de Newton-Raphson. Cette technique de résolution nécessite une estimation initiale de la solution (température et concentration) afin de démarrer le processus itératif. La première estimation de la solution est calculée par le programme STANJAN de Reynolds [6], qui permet de déterminer la composition à l'équilibre thermodynamique (pression et température constantes). Cette première solution est obtenue en minimisant l'enthalpie libre de Gibbs.

Le code utilise ensuite la solution précédente pour initier son nouveau calcul. Mais, dans le cas où l'estimation faite ne permet pas au système de converger, ce dernier bascule sur une intégration des équations en régime transitoire. Une nouvelle solution est trouvée et utilisée pour une nouvelle séquence d'itérations par la méthode de Newton.

❖ Analyses de sensibilité

L'influence d'un paramètre du modèle sur les résultats de la modélisation est déterminée par des analyses de sensibilité. Pour une espèce k dans un modèle cinétique, il est possible de calculer la sensibilité des fractions molaires aux constantes de vitesse. Le coefficient de sensibilité du premier ordre de l'espèce k par rapport à la réaction i est défini par :

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

Cette analyse permet de déterminer les réactions qui agissent sur les concentrations calculées. Lorsque ce coefficient est positif, cela signifie que la concentration de l'espèce augmente avec la vitesse et lorsqu'il est négatif, cela traduit une diminution de la concentration quand la constante de vitesse augmente.

❖ Analyse de voies réactionnelles

L'analyse des voies réactionnelles permet de connaître l'importance des voies de consommation ou de formation des espèces contenues dans le mécanisme. Le programme (PSR) calcule les vitesses globales de formation $V_{f,k}$ et de disparition $V_{d,k}$ de l'espèce k. Ces vitesses s'expriment :

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

Les principales réactions qui forment et qui consomment chaque espèce chimique sont identifiables : la vitesse nette de chaque processus est calculée, ainsi que sa contribution relative parmi l'ensemble des réactions de production ou de consommation de l'espèce considérée.

2. Construction des mécanismes cinétiques

2.1.Démarche générale de modélisation

La combustion d'une espèce hydrocarbonée de type $C_xH_yO_z$ n'est pas une réaction s'effectuant en une seule étape. L'oxydation d'un composé organique ne peut donc être réduite à la réaction globale écrite ci-dessous.

$$C_xH_yO_z + \left(x + \frac{1}{4}y - \frac{1}{2}z\right)O_2 \rightarrow xCO_2 + \frac{1}{2}yH_2O$$

L'élaboration d'un mécanisme réactionnel se fait de façon très méthodique en ajoutant successivement les réactions des espèces contenant un nombre d'atomes de carbone supérieur. Ainsi les modèles cinétiques d'oxydation des hydrocarbures sont constitués de sous mécanismes ou couches (figure IV-2).

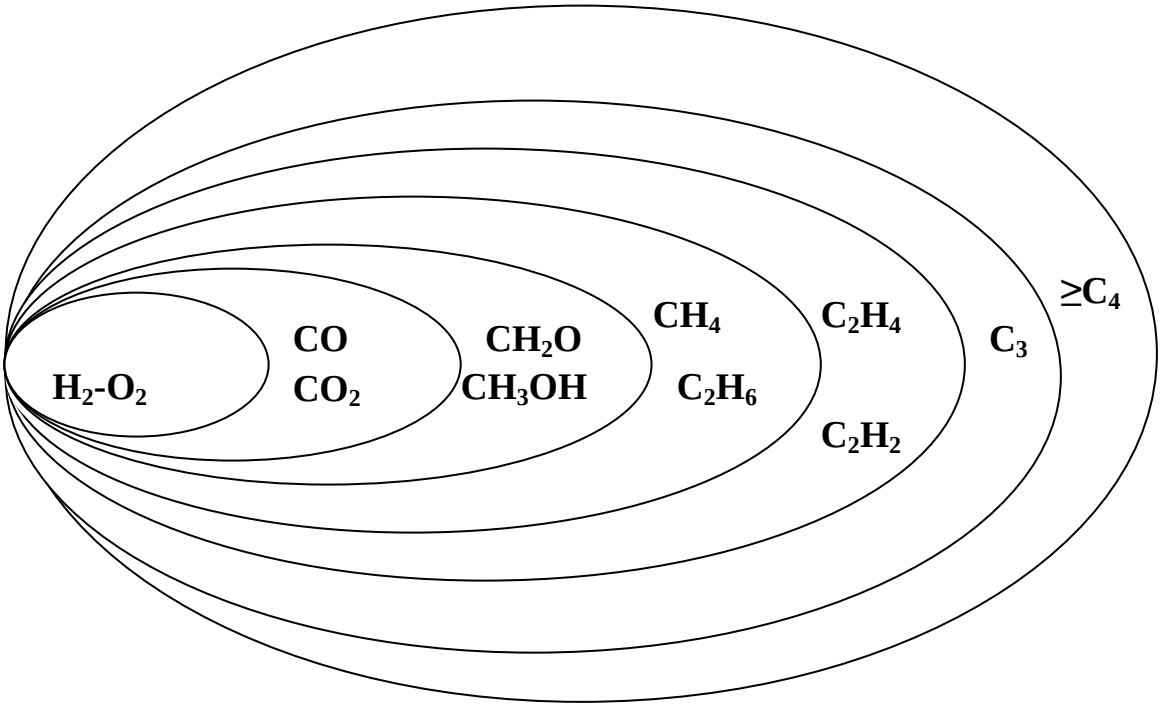


Figure IV-2 Structure schématique d'élaboration d'un modèle cinétique

Comme on peut le constater sur la figure IV - 2, le mécanisme cinétique d'oxydation d'un hydrocarbure se compose d'un noyau commun à toutes les espèces fortement ordonné auquel se greffe une partie spécifique à l'hydrocarbure étudié. Ce noyau commun a une forte influence sur l'oxydation des composés de taille plus importante, et doit être validé sur de nombreux résultats couvrant un large domaine de pression et de température.

Dans tous nos travaux de modélisations, nous avons suivi ce principe pour élaborer les mécanismes d'oxydation des esters méthyliques et ceux des alcools étudiés.

2.2. Description générale du mécanisme d'oxydation des esters méthyliques étudiés

Le mécanisme proposé pour simuler les résultats expérimentaux portant sur l'oxydation des esters méthyliques étudiés dans ce travail a été inspiré des travaux de Dayma *et al* [7] portant sur l'oxydation de l'hexanoate de méthyle. A l'origine, ce mécanisme d'oxydation de l'hexanoate de méthyle, est constitué des mécanismes d'oxydation du butanoate de méthyle mis au point par Fischer *et al* [8], de celui du but-1-ène (105 réactions) proposé par Dagaut *et al* [9] et des réactions spécifiques à l'hexanoate de méthyle (551 réactions), développé par Dayma *et al* [7]. Afin d'obtenir un meilleur accord expérience-modélisation pour les composés concernés par cette étude, des modifications ont été apportées dans ce mécanisme.

Dans un premier temps, nous avons remplacé la partie C_0-C_3 du mécanisme initial [7] par celle de Le Cong [10]. Ensuite, nous avons réécrit le sous-mécanisme d'oxydation du butanoate de méthyle en se basant sur les mêmes règles que celles de l'hexanoate de méthyle. Enfin, nous avons étendu ce mécanisme aux esters supérieurs (pentanoate de méthyle, heptanoate de méthyle, octanoate de méthyle, nonanoate de méthyle et décanoate de méthyle).

2.3.Règles de nomenclature

Dans les travaux de modélisation, la nomenclature utilisée dans les modèles d'oxydation des esters est la même que celle adopté par Fischer *et al* [8] et Dayma *et al* [7]. Ainsi, la méthodologie a consisté à attribuer à chaque atome de carbone de la molécule de départ un chiffre. La position d'un radical est indiquée par le chiffre attribué à l'atome donnant le radical suivi de la lettre « j ». Un exemple dans le cas du décanoate de méthyle est représenté sur la figure IV-3 et le tableau IV-1 résume les différents types de nomenclatures utilisées. Ce principe de nomenclature est appliqué pour tous les autres esters étudiés.

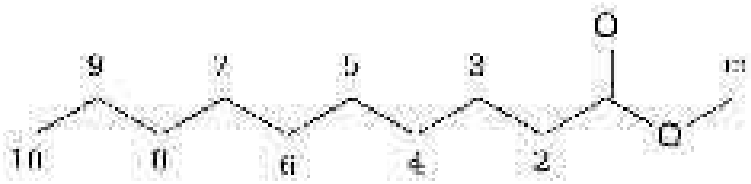


Figure IV-3 : Exemple de nomenclature utilisée dans le modèle : cas du décanoate de méthyle

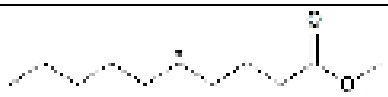
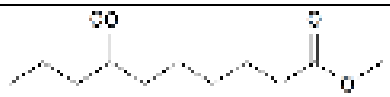
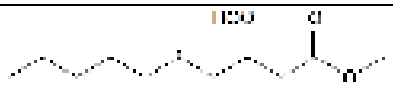
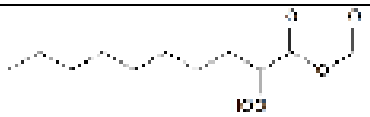
Acronymes	Formule développée de l'espèce
MD5J	
MD3D	
MD7OO	
MD3OOH5J	
MDCY8O6	
MD2OOHM*O	

Tableau IV-1 : Exemple de nomenclature utilisée dans le mécanisme des esters : cas du décanoate de méthyle

2.4.Base C_0-C_4

Cette partie C_0-C_4 comprend toutes les réactions unimoléculaires et bimoléculaires entre espèces

qui contiennent au plus quatre atomes de carbone et pour lesquelles les données cinétiques sont issues en majorité de la littérature. Ainsi, les paramètres cinétiques proviennent pour la plupart des bases de données [11], [12], [13], [14], [15]. Parmi les réactions présentes dans cette base, certaines, dépendent de la pression. Cette influence de la pression sur les constantes de vitesse a été écrite en utilisant les formalismes de Lindemann ou de Troe. Dans cette même base, le mécanisme d'oxydation du but-1-ène développé par Dagaut [9] a également été ajouté, incluant ainsi les réactions du buta-1,3-diène, des radicaux butyles et butadiényles.

2.5.Construction des différents sous-mécanismes

Les sous-mécanismes d'oxydation des esters sont composés des réactions mettant en jeu les réactifs et radicaux issus de ces réactifs, les espèces stables et des réactions des radicaux issus de ces espèces stables.

Les esters méthyliques ont une structure assez proche de celle des alcanes : ils sont constitués d'une chaîne alkyle liée à la fonction ester (cf. figure IV-3). Comme on peut le constater sur cette figure, la chaîne alkyle va réagir de la même manière que les alcanes, seuls les atomes liés au groupement carbonyle vont être affectés par la présence de ce groupement. Afin de prendre en compte les spécificités dues à la présence de cette fonction ester, de nouvelles règles de consommation de ces molécules ont été considérées dans l'estimation des paramètres cinétiques des principaux processus impliqués dans les sous-mécanismes. Les différents processus mis en jeu sont : les réactions d'amorçage unimoléculaire et bimoléculaire qui représentent l'étape d'initiation, les réactions d'isomérisation, les décompositions par β-scission, les métathèses, les oxydations et les additions sur l'oxygène qui constituent les étapes de propagation, les recombinaisons et dismutations qui constituent, elles, les réactions de terminaisons.

- Amorçages unimoléculaires

Les amorçages unimoléculaires correspondent pour les esters étudiés, soit à une rupture d'une liaison C-H, C-C ou C-O.

Concernant les ruptures des liaisons C-H, les constantes de vitesse utilisées sont celles proposées par Dean *et al* [16]. Ainsi une rupture de liaison C-H, qui conduit à la formation un radical primaire et un hydrogène s'effectue avec une constante de vitesse $k = 7{,}90.10^{15}.\exp(-97970/RT)$ et celle conduisant à la formation d'un radical alkyle secondaire avec $k = 5{,}0.10^{15}.\exp(-94990/RT)$. La seule exception quant à l'utilisation de ces constantes concerne le radical où le site radicalaire est porté par l'atome de carbone numéroté 2 (en α du groupement carbonyle). Dans ce cas, la réaction considérée est celle de la recombinaison entre le radical et un atome d'hydrogène pour former l'ester. Pour cette réaction inverse, l'énergie d'activation E est nulle et le facteur préexponentiel A est égal à $A = 1{,}0.10^{14} s^{-1}$.

Les constantes de vitesse des ruptures de liaison C-C utilisées, quant à elles, sont celles proposées par Tsang [17, 18]. Les seules exceptions quant à l'utilisation des constantes proposées par Tsang concernent les ruptures de liaison s'effectuant entre les atomes '2' et 'm'. Ainsi pour la réaction de liaison C-C qui conduit à la formation du radical CH_3OCO et un autre radical alkyle, la constante de vitesse est issue des travaux de Sato *et al* [19] pour l'acétone avec $k = 1{,}13.10^{16}.\exp(-81700/RT)$. La constante de vitesse de la réaction s'effectuant entre un radical alkyle et un radical methoxy pour former l'ester est celle de Glaude *et al* [20] utilisée pour le

diméthylcarbonate et à pour valeur $k = 1{,}0.10^{13} s^{-1}$.

Enfin la constante de vitesse de la rupture de liaison C-O à partir de l'ester pour former un radical methyle plus un radical RCOO, est issue des travaux de Batt *et al* [21], recommandée pour le dimethyléther.

- Amorçages bimoléculaires

Les réactions d'amorçage bimoléculaire prises en compte dans cette partie impliquent l'arrachage des atomes d'hydrogène de l'ester par la molécule d'oxygène conduisant à la formation des radicaux alkyl-esters plus les radicaux HO_2. Les valeurs des constantes de vitesse utilisées pour ces réactions sont celles proposées par Tsang *et al* [18] pour l'arrachement d'un atome d'hydrogène primaire ou secondaire. Dans le cas où la réaction a lieu avec un atome d'hydrogène porté par les carbones numérotés '2' et 'm', les paramètres cinétiques diffèrent. Pour un arrachement d'atome d'hydrogène porté par le carbone '2', le facteur préexponentiel A est égal à $4{,}00.10^{13}$ $cm^3.mol^{-1}.s^{-1}$ et l'énergie d'activation est égale à l'enthalpie de réaction. Lorsque la réaction a lieu avec un hydrogène porté par le carbone m, les paramètres cinétiques utilisés sont issus des travaux de Dayma *et al* [22] sur le méthanol.

- Les réactions de métathèses

Ces réactions impliquent également, tout comme les amorçages bimoléculaires, l'arrachement des atomes d'hydrogène par de petits radicaux (H, O, OH, HO_2, HCO, CH_3, etc.) pour former des radicaux alkyl-esters. Les paramètres cinétiques utilisés sont issus des travaux de Fischer *et al* [23] à l'exception des réactions avec un atome d'hydrogène porté par les atomes de carbone '2' et 'm'. Les paramètres cinétiques utilisés dans le cas où l'hydrogène est sur le carbone '2', sont issus de nombreux travaux résumés dans le tableau IV-2.

Radical X	A	n	E	Référence
H	$5{,}40 \times 10^{04}$	2,50	-1900	[24]
O	$8{,}80 \times 10^{10}$	0,70	3250	[24]
OH	$3{,}00 \times 10^{06}$	2,00	-1520	[25]
HO_2	$6{,}40 \times 10^{03}$	2,60	12400	[24]
HCO	$1{,}14 \times 10^{09}$	1,30	15500	[26]
CH_3	$1{,}00 \times 10^{11}$	0,00	7300	[24]
CH_3O	$1{,}78 \times 10^{12}$	0,00	1200	[22]
CH_2OH	$3{,}60 \times 10^{01}$	2,95	10000	[26]
CH_3O_2	$6{,}40 \times 10^{03}$	2,60	12400	[24]
C_2H_3	$4{,}00 \times 10^{11}$	0,00	14300	[8]
C_2H_5	$2{,}20 \times 10^{00}$	3,50	14140	[26]
a-C_3H_5	$8{,}00 \times 10^{01}$	3,30	17170	[26]
RO_2	$1{,}00 \times 10^{12}$	0,00	14550	[26]

Tableau IV-2 : Paramètres cinétiques utilisés pour les réactions de métathèses (Ester + X = radical alkyl-ester + HX)

Dans le cas où l'hydrogène est porté par le carbone 'm', les constantes de vitesse sont celles proposées par Dayma *et al* [22] pour la formation de CH_2OH dans l'oxydation du méthanol.

- Les réactions d'addition

Ces réactions concernent les réactions d'additions des radicaux R et ROOH sur la molécule d'oxygène. Les constantes de vitesse utilisées pour ces types de réactions sont estimées selon les recommandations de Buda *et al* [27]. Ces constantes de vitesse ne sont pas appliquées lorsque l'addition de O_2 concerne sur les atomes de carbone '2' et 'm'. Dans le cas du carbone m, la constante de vitesse utilisée est proposée par Dagaut *et al* [28] et dans le cas du carbone '2', la constante de vitesse préférée provient des travaux de thèse de Touchard [26].

➢ Les réactions d'isomérisation des radicaux

Elles concernent les réactions d'isomérisation des radicaux alkyles R et peroxyalkyles ROO et constituent, après l'addition sur l'oxygène, les processus dont les constantes de vitesse sont les plus sensibles. Pour les constantes de vitesse d'isomérisation utilisées dans les mécanismes, l'estimation du facteur préexponentiel se fait grâce à l'équation V-1 proposée par Brocard *et al* [29]. L'énergie d'activation est estimée comme étant la somme de l'énergie de tension de cycle de l'état de transition et de l'énergie d'arrachage de l'atome d'hydrogène.

$$A = \frac{k_B T}{h} \times rpd \times \exp\left[1 + \frac{\Delta n_{i,rot}^{TS} \times 3{,}5}{R}\right] \qquad \text{Equation V-1}$$

Dans cette étude, seuls les états de transition possédant un cycle à 5, 6, 7 et 8 centres sont considérés. Concernant les isomérisations des radicaux alkyles R, les constantes de vitesse sont calculées selon les recommandations de Glaude *et al* [30] qui consistent à prendre davantage en compte l'environnement de l'atome de carbone porteur de l'atome d'hydrogène H à arracher. Il est à noter que l'énergie d'activation des réactions d'isomérisations faisant intervenir les carbones 2 et m est augmentée de 5 kcal à cause de la présence du groupe acyloxy dans le cycle de l'état de transition.

Dans le cas des réactions d'isomérisation des radicaux ROO, les constantes de vitesse sont calculées à partir des recommandations de Buda *et al* [27] à l'exception des isomérisations où l'hydrogène est arraché au carbone '2', l'énergie d'activation est augmentée de 3 kcal. De plus, lorsque l'arrachement de l'hydrogène se fait entre les carbones 2 et m, les constantes de vitesse utilisées sont issues des travaux de Hakka MH *et al* [31].

➢ Les réactions de décomposition des radicaux par β-scission

Les radicaux créés dans le mécanisme peuvent se décomposer par rupture de liaisons en β du site radicalaire. Les réactions considérées dans ce cas, prennent en compte la rupture de liaison C-C, C-O et C-H.

Concernant les décompositions C-C des radicaux alkyles, les constantes de vitesse utilisées sont issues des travaux de Dayma *et al* [32] à l'exception des réactions des radicaux qui portent le site radicalaire sur les carbones 2 et m. Dans le cas où le site radicalaire est porté par le carbone 2, la constante de vitesse utilisée est celle de El-Nahas *et al* [33].

Dans le cas de rupture de liaison C-O, le site radicalaire est porté sur le carbone 'm' et dans cette condition, la constante de vitesse utilisée est celle de Dooley *et al* [34].

Quant aux réactions par rupture de liaison C-H qui concernent les atomes d'hydrogène secondaires, les constantes de vitesse utilisées sont issues des travaux de Touchard *et al* [24]. Pour celles qui impliquent les atomes d'hydrogène primaires, les constantes utilisées proviennent des travaux de thèse de Touchard [26].

➢ Les réactions d'oxydation

Ce sont des réactions d'arrachage sur un radical, d'un atome d'hydrogène par le dioxygène. Ce

type de réaction conduit à la formation de l'alcène conjugué plus un radical HO_2. Dans ces réactions, les constantes de vitesse utilisées sont issues des travaux de Buda *et al* [27]. Par contre pour les réactions d'oxydations des radicaux qui ont leur site radicalaire sur les carbones 2 et m, les constantes issues des travaux de Battin-Leclerc [35] sont utilisées.

- Les réactions de décomposition des éthers cycliques

Les éthers cycliques sont dégradés par des réactions de métathèses avec de petits radicaux (H, OH, HO_2, CH_3O, CH_3O_2). Les constantes de vitesse utilisées pour ces réactions sont issues essentiellement des travaux de Fischer *et al* [8] à l'exception des éthers cycliques impliquant le carbone 2 dans leur cycle. Dans ce cas, on a considéré que l'hydrogène porté par ce carbone ne peut pas facilement être arraché par ces petits radicaux en raison de l'encombrement stérique. Par ailleurs, il a été nécessaire de multiplier par 4 les constantes de vitesse des réactions conduisant à la formation de prop-2-enoate de méthyle afin d'expliquer la forte quantité de ce composé à basse température.

2.6.Description générale du mécanisme d'oxydation des alcools étudiés

Nos recherches bibliographiques ont montré que de nombreux modèles d'oxydation du méthanol et de l'éthanol existent, mais très peu d'études sur les alcools supérieurs. Dans cette partie, nous nous sommes basés principalement sur les modèles d'oxydation du méthanol [22, 36], de l'éthanol [37] et du butanol [38] . Ces mécanismes décrivant l'oxydation de ces hydrocarbures, ont été validés par modélisation d'expériences menées en réacteur auto-agité. A partir de ces travaux, nous avons apporté des modifications aux sous-mécanismes de l'éthanol initialement présents dans les modèles développés. Dans le tableau IV-3 sont présentées quelques modifications apportées dans le mécanisme afin d'avoir un meilleur accord expérience-modélisation.

Réaction	A	n	E	Référence
$C_2H_5OH + OH = C_2H_4OH + H_2O$	$6,20 \times 10^3$	2,7	-576	[39]
$C_2H_5OH + OH = CH3CHOH + H_2O$	$1,31 \times 10^5$	2.4	-1457	[39]
$C_2H_5OH + OH = CH_3CH2O + H_2O$	$2,81 \times 10^2$	3,0	-580	[39]
$C_2H_5OH + H = C_2H_4OH + H_2$	$1,88 \times 10^3$	3,2	7152	[40]
$C_2H_5OH + H = CH_3CHOH + H_2$	$1,79 \times 10^5$	2,5	3420	[40]
$C_2H_5OH + H = CH_3CH_2O + H_2$	$5,55 \times 10^{-23}$	10,6	-4459	[40]
$C_2H_5OH + O = C_2H_4OH + OH$	$9,69 \times 10^2$	3,2	4658	[41]
$C_2H_5OH + O = CH_3CHOH + OH$	$1,45 \times 10^5$	2,4	876	[41]
$C_2H_5OH + O = CH_3CH_2O + OH$	$1,46 \times 10^{-3}$	4,7	1727	[41]
$C_2H_5OH + CH_3 = C_2H_4OH + CH_4$	$3,30 \times 10^2$	3,3	12291	[42]
$C_2H_5OH + CH_3 = CH_3CHOH + CH_4$	$1,99 \times 10^1$	3,4	7635	[42]
$C_2H_5OH + CH_3 = CH_3CH_2O + CH_4$	$2,04 \times 10^0$	3,6	7722	[42]

Tableau VI-3 : Modifications apportées aux constantes de vitesse de quelques réactions du sous-mécanisme de l'éthanol (unités : mol, cm^3, s, cal)

En se basant sur les sous-mécanismes du méthanol, de l'éthanol et du butan-1-ol, nous avons développé ensuite ceux du pentan-1-ol et de l'hexan-1-ol. Les réactions proposées dans les sous-mécanismes du pentan-1-ol et de l'hexan-1-ol s'appuient sur les mêmes schémas que ceux des alcools inférieurs proposés et qui contiennent :

- ✓ des réactions d'amorçage unimoléculaire et bimoléculaire par rupture de liaisons C-C, C-H et C-O
- ✓ des réactions d'isomérisation des radicaux
- ✓ des décompositions de radicaux

Conclusion

Les outils de calcul du package Chemkin utilisés ont été présentés. C'est avec ces outils et des mécanismes cinétiques détaillés dont la structure a été présentée que nous avons tenté de reproduire nos résultats expérimentaux obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux. Les chapitres V et VI présentent les résultats expérimentaux et théoriques obtenus pour respectivement l'oxydation des esters méthyliques et des alcools étudiés.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar, J. A. Miller

   PSR: A FORTRAN program for modeling well-stirred reactors, in *SAND86-8209*. 1986, Sandia National Laboratories: Livermore, CA.

2. 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.

3. 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.

4. C. Muller, V. Michel, G. Scacchi, G. M. Come

   THERGAS: A computer program for the evaluation of thermochemical data of molecules and free radicals in the gas phase. Journal de Chimie physique et Physico-Chimie Biologique, 1995. **92** (5): p. 1154-1178.

5. S. W. Benson

   Thermochemical Kinetics. Second ed. 1976, New York: Wiley, Interscience.

6. C. W. Reynolds

   The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive programm STANJAN, 1986, Department of Mechanical Engineering: Stanford University

7. G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

   Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. Energy and Fuels, 2008. **22** (3): p. 1469-1479.

8. E. M. Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook

   Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. Proceedings of the Combustion Institute, 2000. **28** : p. 1579-1586.

9. P. Dagaut

   On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002. **4** (11): p. 2079-2094.

10. T. Le Cong

Etude 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, 2007

11. W. Tsang and R.F. Hampson

Chemical Kinetic Database for Combustion Chemistry .1. Methane and Related-Compounds. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1986. **15** (3): p. 1087-1279.

12. D. L. Baulch, C. J. Cobos, R. A. Cox, P. Frank, G. Hayman, T. Just, J. A. Kerr, T. Murrells, M. J. Pilling, J. Troe, R. Walker and J. Warnatz

Evaluated Kinetic Data for Combustion Modeling Supplement-I. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1994. **23** (6): p. 847-1033.

13. E. Ranzi, M. Dente, T. Faravelli, G. Pennati

Prediction of Kinetic-Parameters for Hydrogen Abstraction Reactions. Combustion Science and Technology, 1994. **95** (1-6): p. 1-50.

14. N. M. Marinov

A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation. International Journal of Chemical Kinetics, 1999. **31** (3): p. 183-220.

15. P. Dagaut, M. Cathonnet and J.C. Boettner

Kinetic Modeling of Propane Oxidation and Pyrolysis. International Journal of Chemical Kinetics, 1992. **24** (9): p. 813-837.

16. A. M. Dean

Predictions of Pressure and Temperature Effects Upon Radical-Addition and Recombination Reactions. Journal of Physical Chemistry, 1985. **89** (21): p. 4600-4608.

17. W. Tsang

Evidence for Strongly Temperature-Dependent a Factors in Alkane Decomposition and High Heats of Formation for Alkyl Radicals. International Journal of Chemical Kinetics, 1978. **10** (8): p. 821-837.

18. W. Tsang

Chemical Kinetic Data-Base for Combustion Chemistry .3. Propane. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1988. **17** (2): p. 887-952.

19. K. Sato and Y. Hidaka

Shock-tube and modeling study of acetone pyrolysis and oxidation. Combustion and Flame, 2000. **122** (3): p. 291-311.

20. P.-A. Glaude W.J. Pitz and M.J. Thomson

Chemical kinetic modeling of dimethyl carbonate in an opposed-flow diffusion flame. Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30** (1): p. 1111-1118.

21. L. Batt, G.Alvarado-Salinas, I. A. Reid, C. Robinson and D. B. Smith

The pyrolysis of dimethyl ether and formaldehyde. Symposium (International) on Combustion, 1982. **19** (1): p. 81-87.

22. G. Dayma, K. Hadj Ali and P. Dagaut

Experimental and detailed kinetic modeling study of the high pressure oxidation of methanol sensitized by nitric oxide and nitrogen dioxide. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 411-418.

23. E. M. Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook

Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. Proceedings of the Combustion Institute, 2000. **28** (2): p. 1579-1586.

24. S. Touchard, F. Buda, G. Dayma, P.-A. Glaude, R. Fournet and F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the oxidation of 1-pentene at high temperature. International Journal of Chemical Kinetics, 2005. **37** (8): p. 451-463.

25. G. Dayma, P.-A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the oxidation of cyclohexene. International Journal of Chemical Kinetics, 2003. **35** (7): p. 273-285.

26. S. Touchard

Construction et validation de modèles cinétiques détaillés pour la combustion de mélanges modèles des essences, Thèse Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, 2005.

27. F. Buda, R. Bounaceur, V. Warth, P.-A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc

Progress toward a unified detailed kinetic model for the autoignition of alkanes from C-4 to C-10 between 600 and 1200 K. Combustion and Flame, 2005. **142** (1-2): p. 170-186.

28. P. Dagaut, J. Luche and M. Cathonnet

The low temperature oxidation of DME and mutual sensitization of the oxidation of DME and nitric oxide: Experimental and detailed kinetic modeling. Combustion Science and Technology, 2001. **165**: p. 61-84.

29. 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. **52**: p. 25-35.

30. P.-A. Glaude,

Modeling the oxidation of mixtures of primary reference automobile fuels. Energy & Fuels, 2002. **16**(5): p. 1186-1195.

31. M. H. Hakka, H. Bennadji, J. Biet, M. Yahyaoui, B. Sirjean, V. Warth, L. Coniglio, O. Herbinet, P. A. Glaude, F. Billaud, F. Battin-Leclerc

Oxidation of methyl and ethyl butanoates. International Journal of Chemical Kinetics. **42**(4): p. 226-252.

32. G. Dayma, P. A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc

Experimental and modeling study of the oxidation of cyclohexene. Int J Chem Kinet, 2003. **35**(7): p. 273-285.

33. A. M. El-Nahas, M. V. Navarro, J. M. Simmie, J. W. Bozzelli, H. J. Curran, S. Dooley and W. Metcalfe

Enthalpies of formation, bond dissociation energies and reaction paths for the decomposition of model biofuels: Ethyl propanoate and methyl butanoate. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111** (19): p. 3727-3739.

34. S. Dooley, H.J. Curran and J.M. Simmie

Autoignition measurements and a validated kinetic model for the biodiesel surrogate, methyl butanoate. Combustion and Flame, 2008. **153** (1-2): p. 2-32.

35. F. Battin-Leclerc

Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates. Progress in Energy and Combustion Science, 2008. **34** (4): p. 440-498.

36. T. Le Cong, P. Dagaut and G. Dayma

Oxidation of Natural Gas, Natural Gas/Syngas Mixtures, and Effect of Burnt Gas Recirculation: Experimental and Detailed Kinetic Modeling. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2008. **130** (4): p. 041502-10.

37. P. Dagaut, J.C. Boettner and M. Cathonnet

Kinetic Modeling of Ethanol Pyrolysis and Combustion. Journal de Chimie Physique et De Physico-Chimie Biologique, 1992. **89** (4): p. 867-884.

38. S. M. Sarathy, M. J. Thomson, C. Togbé, P. Dagaut, F. Halter, C. Mounaïm-Rousselle

An experimental and kinetic modeling study of n-butanol combustion. Combustion and Flame, 2009. **156** (4): p. 852-864.

39. S. Xu and M.C. Lin

Theoretical study on the kinetics for OH reactions with CH3OH and C2H5OH. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 159-166.

40. J. Park, Z.F. Xu and M.C. Lin

Thermal decomposition of ethanol. II. A computational study of the kinetics and mechanism for the H + C[sub 2]H[sub 5]OH reaction. The Journal of Chemical Physics, 2003. **118** (22): p. 9990-9996.

41. C. W. Wu, Y. P. Lee, S. C. Xu and M. C. Lin

Experimental and theoretical studies of rate coefficients for the reaction O(P-3) plus C2H5OH at high temperatures. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111**(29): p. 6693-6703.

42. Z. F. Xu, J. Park and M.C. Lin

Thermal decomposition of ethanol. III. A computational study of the kinetics and mechanism for the CH[sub 3] + C[sub 2]H[sub 5]OH reaction. The Journal of Chemical Physics, 2004. **120**(14): p. 6593-6599.

V

Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation d'esters méthyliques

Sommaire

V. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation d'esters méthyliques 97

1. Etudes expérimentale et de modélisation de l'oxydation des esters méthyliques saturés.....97

1.1. Cas du butanoate de méthyle 97

1.2. Oxydation du propanoate d'éthyle 105

1.3. Oxydation du pentanoate de méthyle 115

1.4. Oxydation de l'hexanoate de méthyle 121

1.5. Oxydation de l'heptanoate de méthyle.....126

1.6. Oxydation de l'octanoate de méthyle 134

1.7. Oxydation du nonanoate de méthyle.....143

1.8. Oxydation du décanoate de méthyle 153

2. Etude expérimentale de l'oxydation d'esters méthyliques insaturés.....164

2.1 Oxydation du hex-3-énoate de méthyle. 165

2.3 Oxydation du oct-2-énoate de méthyle 168

2.4 Oxydation du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle 173

3. Comparaison des oxydations d'esters méthyliques saturés et insaturés 186

3.2 Comparaison des vitesses d'oxydation des molécules.....187

3.3 Comparaison des fractions molaires des produits formés.....191

4. Comparaison de l'oxydation des esters et des alcanes.....200

4.1 Comparaison de la réactivité.....200

4.2 Comparaison des fractions molaires de quelques espèces formées 202

V. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation d'esters méthyliques

Ce chapitre présente les travaux expérimentaux et théoriques portant sur l'oxydation d'une série d'esters méthyliques allant du butanoate de méthyle au décanoate de méthyle. Ainsi, nous avons étudié en réacteur auto-agité l'oxydation d'une douzaine d'esters méthyliques à haute pression (10 atm), dans un large domaine de température (560-1200 K) et de richesse (0,3-2). Les résultats obtenus (profils de concentration en fonction de la température des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables) ont été utilisés pour valider le modèle cinétique proposé. Ce modèle nous a également permis d'analyser les voies de consommation de ces composés et d'analyser la sensibilité des simulations aux paramètres cinétiques utilisés. Ce chapitre présente également une étude comparative essentiellement expérimentale de l'oxydation des esters méthyliques à chaîne latérale saturée avec des esters méthyliques mono-insaturés.

Enfin, mis à part les composés purs étudiés, deux mélanges biodiesel-modèle/alcools (octanoate de méthyle/éthanol et octanoate de méthyle/butan-1-ol) ont été étudiés afin de mettre en évidence les interactions pouvant exister entre les molécules durant leur oxydation. Les résultats obtenus sont présentés en annexe.

1. Etudes expérimentale et de modélisation de l'oxydation des esters méthyliques saturés

1.1. Cas du butanoate de méthyle

Parmi les esters méthyliques étudiés, le butanoate de méthyle ($C_5H_{10}O_2$), nommé MB dans ce travail, est le premier ester étudié. Cet ester méthylique est constitué d'une chaîne alkyle saturée longue de trois atomes de carbone et liée à une fonction ester méthylique. La figure V-1 présente la formule semi-développée de cet ester.

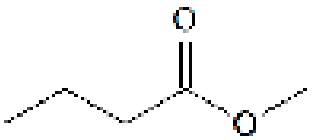


Figure V-1 : Formule semi-développée du butanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

Le butanoate de méthyle a été oxydé en réacteur auto-agité par jets gazeux dans des conditions expérimentales récapitulées dans le tableau V-1.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MB} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$21{,}70.10^{-3}$	$9{,}773.10^{-1}$	0,3	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$10{,}85.10^{-3}$	$9{,}882.10^{-1}$	0,6	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}50.10^{-3}$	$9{,}925.10^{-1}$	1	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}30.10^{-3}$	$9{,}958.10^{-1}$	2	770-1100

Tableau V-1 : Oxydation du butanoate de méthyle (MB) en réacteur auto-agité : Conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Lors de l'oxydation du butanoate de méthyle, nous avons identifié douze espèces moléculaires en plus des réactifs. Les fractions molaires de toutes les espèces ont été mesurées et tracées en fonction de la température. L'eau (H_2O), le monoxyde de carbone (CO), le dioxyde de carbone (CO_2), le méthane (CH_4), l'éthylène (C_2H_4), le formaldéhyde (CH_2O) et l'hydrogène (H_2) sont formés en grande quantité, tandis que l'acétylène (C_2H_2), l'éthane (C_2H_6), le propène (C_3H_6), le but-1-ène (1-C_4H_8) et le but-3-énoate de méthyle (MB3D) sont formés en plus faible quantité. Le butanoate de méthyle ne réagit qu'à haute température (T>770 K), résultat mentionné dans les précédents travaux de Gail *et al.*[1] au laboratoire.

c) Confrontation modèle-expérience

Les profils expérimentaux (grands symboles) et simulés (lignes et petits symboles) correspondant à l'évolution des fractions molaires des réactifs et des produits formés en fonction de la température sont présentés sur les figures V-2 à V-5 pour les quatre richesses. Il apparaît que le modèle reproduit convenablement les profils du butanoate de méthyle, des oxydes de carbone, de l'eau et du formaldéhyde. Cependant, le modèle sous-estime les quantités de l'éthylène, du propène et d'acétylène.

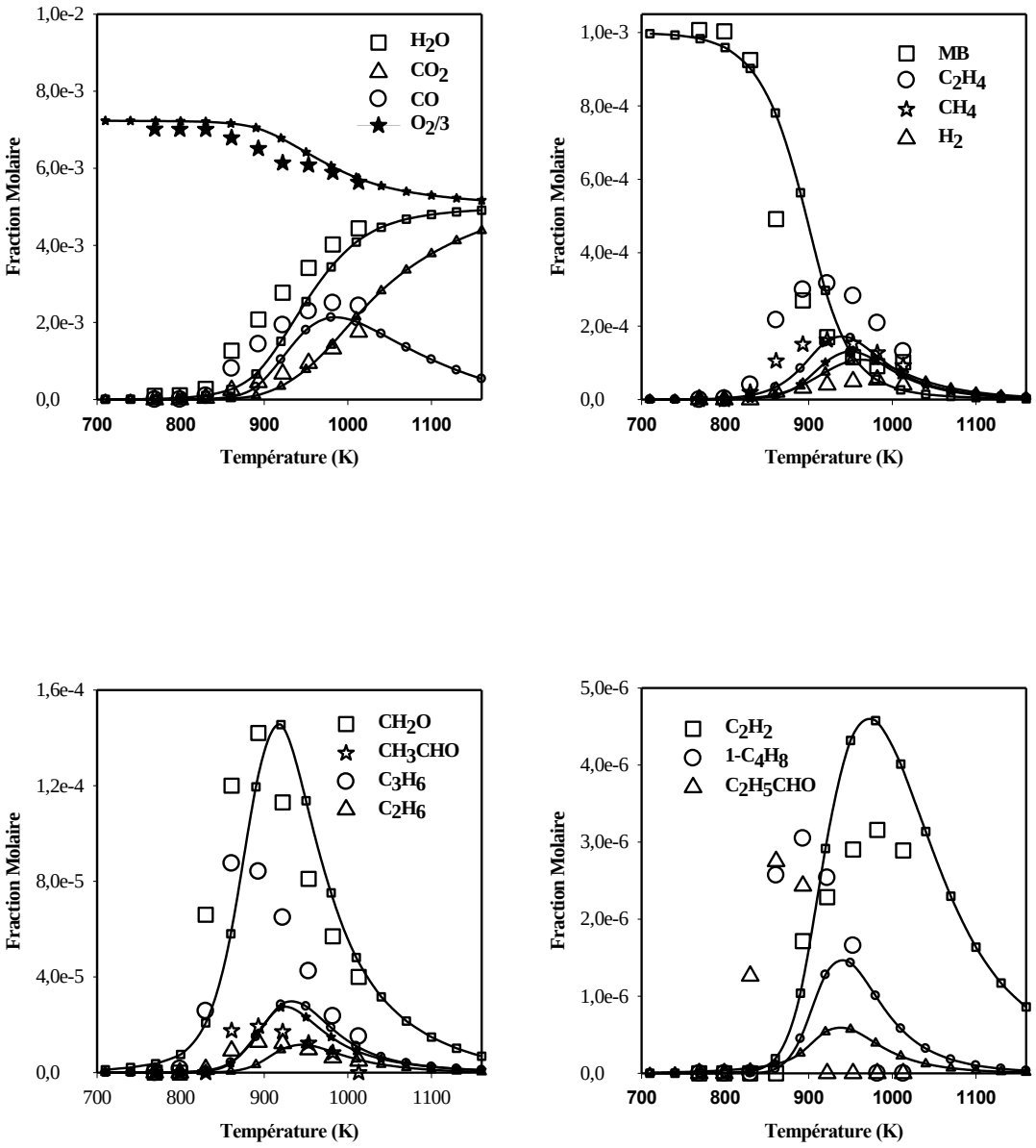


Figure V-2 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MB ; 21600 ppm de O_2 ; φ=0,3 ; τ=0,7 s

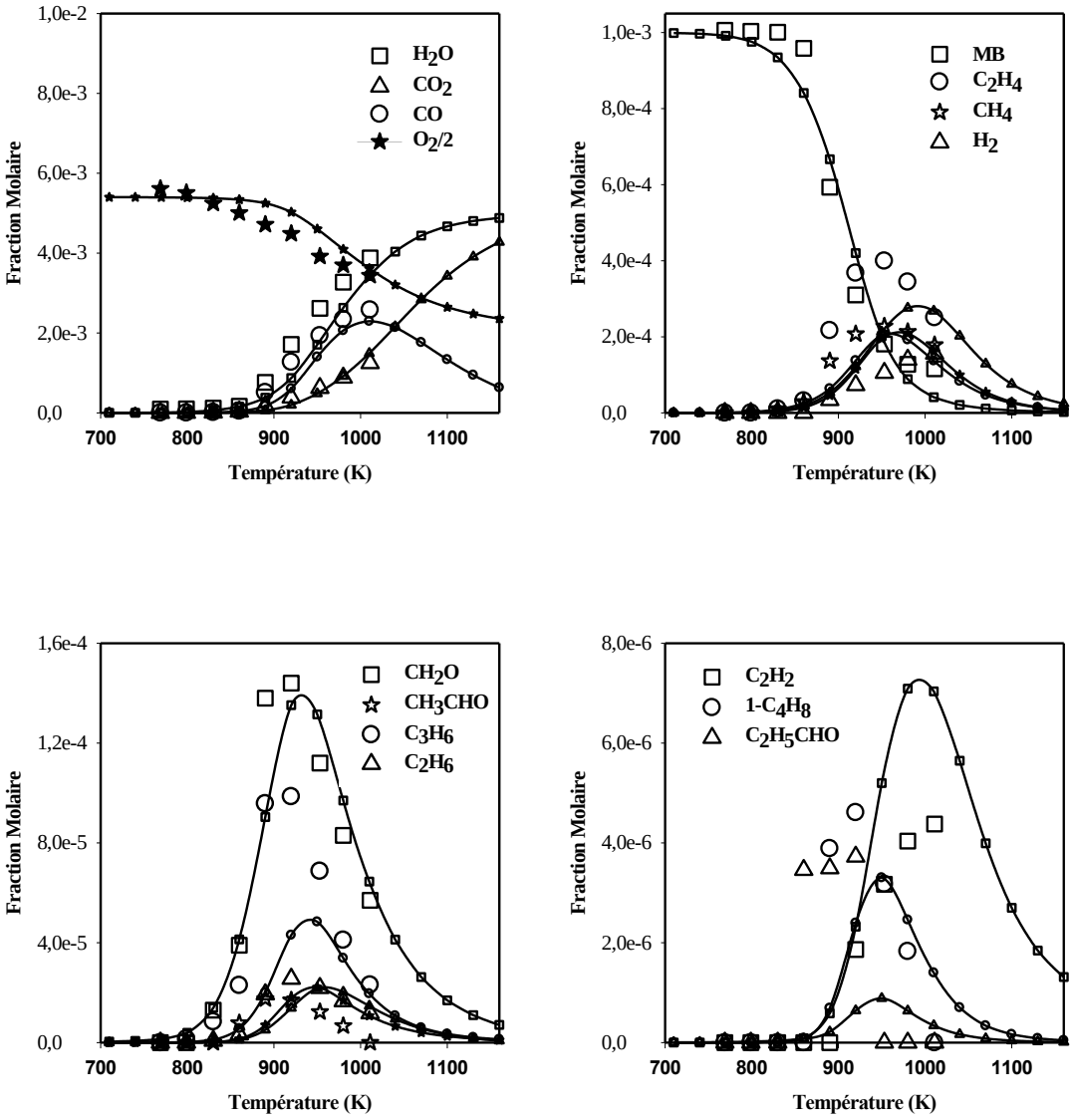


Figure V-3 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MB ; 10800 ppm de O_2 ; φ=0,6 ; τ=0,7 s

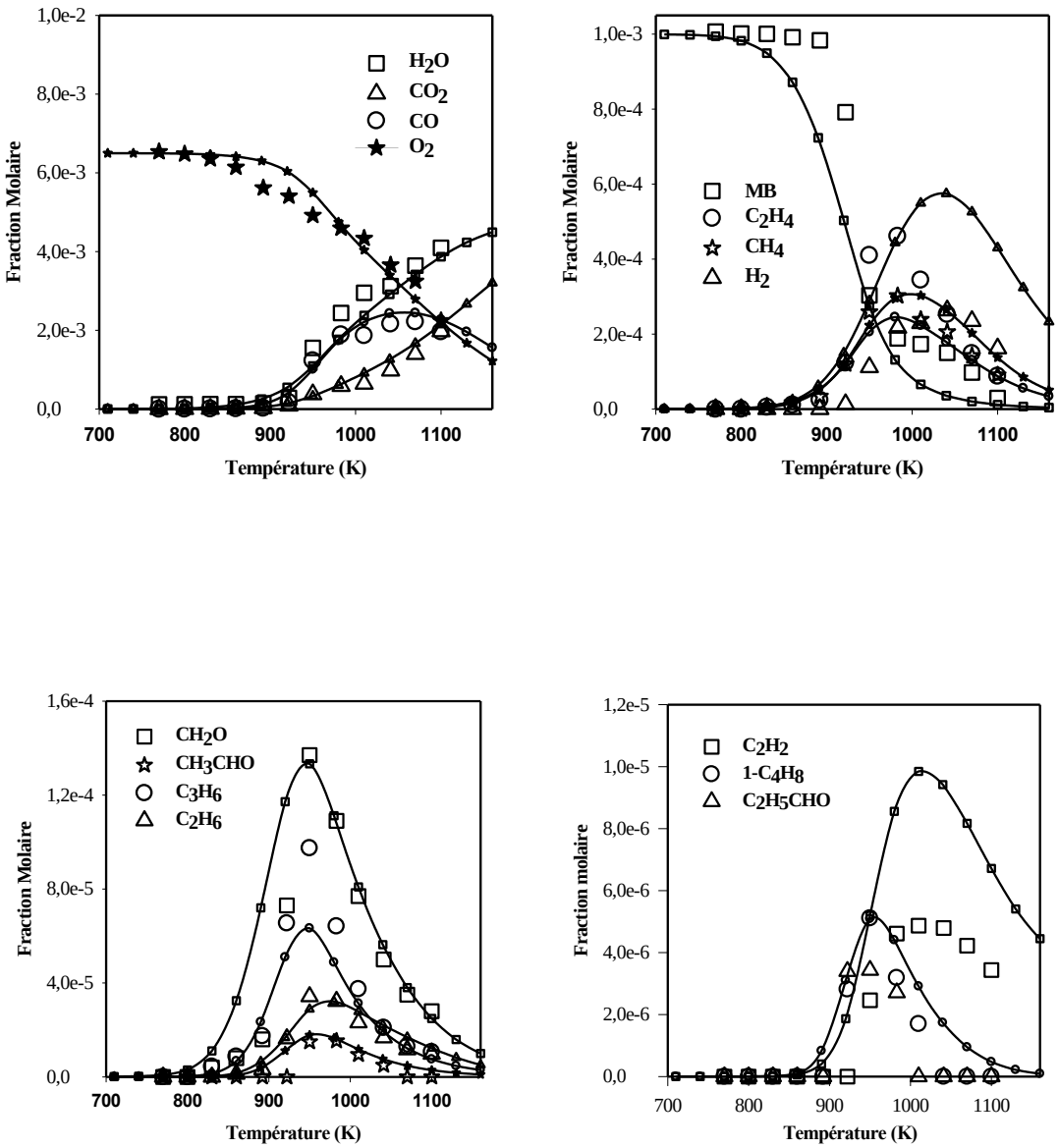


Figure V-4 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MB ; 6500 ppm de O_2 ; φ=1 ; τ=0,7 s

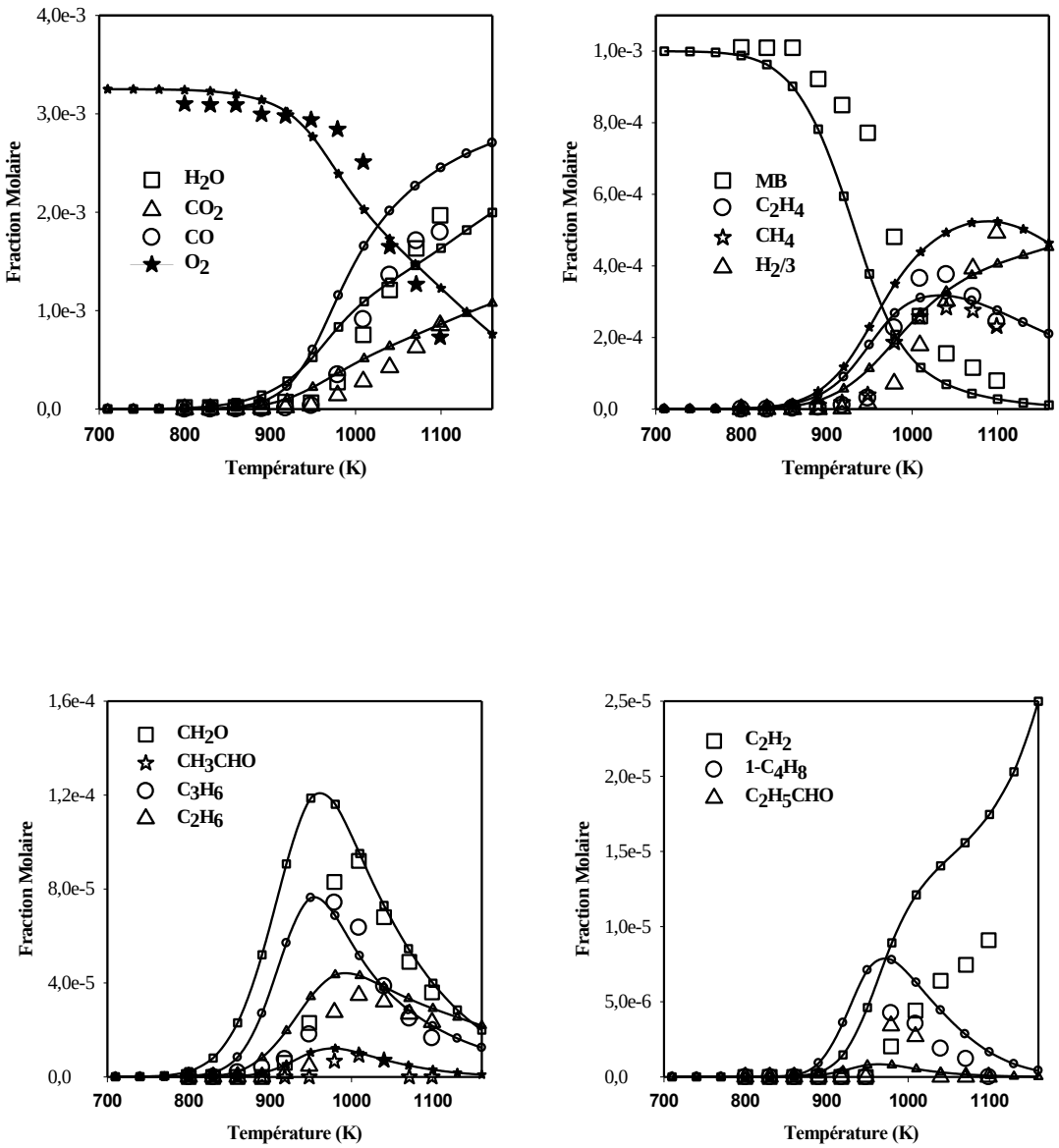


Figure V-5 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MB ; 3250 ppm de O_2 ; φ=2 ; τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) pour déterminer les principales voies de dégradation du butanoate de méthyle. Les principales voies de dégradation de l'hydrocarbure à T=920 K et à un temps de passage de 0,7 s sont représentées sur la figure V-6.

A 920 K, le butanoate de méthyle réagit par des réactions de métathèse avec les radicaux H et OH pour former des radicaux, notamment le radical MB2J. Ces radicaux vont ensuite à leur tour réagir selon différentes voies constituées principalement par des réactions d'isomérisation permettant la redistribution des isomères et des réactions de décomposition par rupture de liaison C-C. Ainsi, MB4J va se décomposer en C_2H_4 et ME2J qui va se décomposer à son tour pour former CH_2CO et CH_3O. MB3J réagit par rupture de liaison pour former C_3H_6 et CH_3OCO. MBMJ se décompose totalement en CH_2O et nC_3H_7CO.

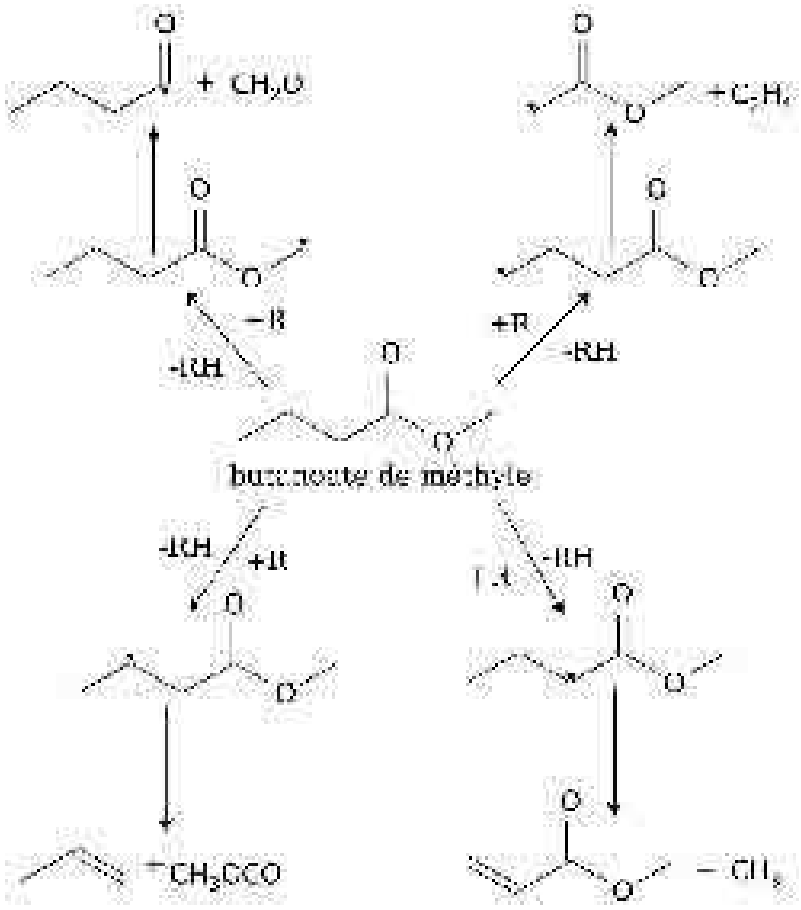


Figure V-6 : Voies de dégradation principales du butanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange butanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=920 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) grâce au modèle. Les résultats de cette analyse à T=920 K, sont présentés sur la figure V-7 pour les réactions les plus importantes.

Dans ces conditions, les réactions les plus importantes et qui concernent directement l'hydrocarbure, sont les réactions de métathèse avec les radicaux H (MB + H ⇄ MB2J + H_2, S=-0,1360) et OH (MB + OH ⇄ MB2J + H_2O, S=-0,2190). Ces réactions accélèrent la consommation du butanoate de méthyle. Une autre réaction sensible est celle entre les radicaux méthyle et hydroperoxyle (CH_3 + HO_2 ⇄CH_4 + O_2, S=0,151) avec un coefficient de sensibilité positif. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction (CH_3 + HO_2 ⇄CH_3O + OH, S= -0,499.

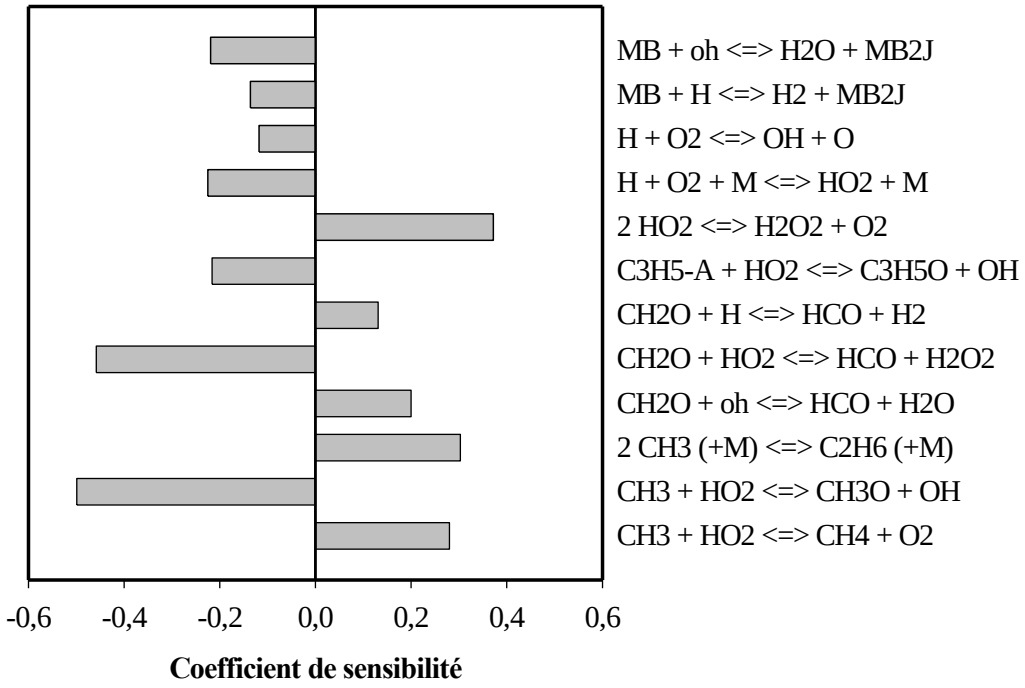


Figure V-7 : Coefficients de sensibilité pour le butanoate de méthyle lors de l'oxydation du butanoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm et φ=1) à T=950 K

1.2. Oxydation du propanoate d'éthyle

a) Conditions expérimentales

Les conditions expérimentales dans lesquelles le propanoate d'éthyle a été oxydé sont résumées dans le tableau V-2.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{EP} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$21{,}70.10^{-3}$	$9{,}773.10^{-1}$	0,3	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$10{,}85.10^{-3}$	$9{,}882.10^{-1}$	0,6	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}50.10^{-3}$	$9{,}925.10^{-1}$	1	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}30.10^{-3}$	$9{,}958.10^{-1}$	2	770-1100

Tableau V-2 Oxydation du propanoate d'éthyle ne réacteur auto-agité : Conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

L'oxydation du propanoate d'éthyle a été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm). Les résultats des expériences (grands symboles) sont indiqués sur les figures V-8 à V-11. Les expériences nous ont permis d'obtenir l'évolution des réactifs, produits et principales espèces intermédiaires en fonction de la température. La concentration des principaux produits formés varie en fonction de la richesse. Ainsi, on note que H_2O se forme majoritairement pour les richesses 0,3 ; 0,6 et 1. Le monoxyde de carbone est formé en grande quantité tandis que le dioxyde de carbone est présent en faible quantité à φ=2.

Les principaux intermédiaires formés sont : l'éthylène (C_2H_4), l'acide propanoïque (C_2H_5COOH), le formaldéhyde (CH_2O) et le méthane (CH_4).

c) Confrontation modèle-expérience

Le mécanisme utilisé pour simuler l'oxydation du propanoate d'éthyle est issu des travaux de Metcalfe *et al.* [2]. Des modifications ont été apportées dans le mécanisme d'origine développé dans leur précédent travail [3] pour rendre les simulations conformes aux données expérimentales :

- La constante de vitesse de la réaction $EP \rightleftarrows C_2H_4 + C_2H_5COOH$, a été multipliée par quatre, passant donc de $4{,}0 \times 10^{12} \exp(-50000/RT)$ à $1{,}6 \times 10^{13} \exp(-50000/RT)$.
- Les constantes de vitesse des réactions citées ci-dessous ont été divisées par un facteur 2 :

  $EP + HO_2 \rightleftarrows EP2J + H_2O_2$

  $EP + HO_2 \rightleftarrows EPEJ + H_2O_2$

  $C_2H_5COOH + HO_2 \rightleftarrows CH_3CHCOOH + H_2O_2$

Les figures V-8 à V-11 présentent les résultats des simulations (lignes et petits symboles) et des profils de fraction molaire obtenus en réacteur (grands symboles).

On remarque que la consommation du propanoate d'éthyle débute trop tôt pour toutes les richesses. Conséquence de ceci, l'hydrogène est systématiquement surestimé. Cependant, les valeurs de la plupart des espèces intermédiaires (CH_4, C_2H_4, C_2H_6, C_3H_6, CH_2O, CH_3CHO) sont correctement estimées, les produits de fin de combustion (CO_2, CO, H_2O) sont également bien reproduits quelque soit la richesse. Néanmoins, les quantités de C_2H_4 et de C_3H_6 à $\varphi=2$ sont sous-estimées à haute température. Cette sous-estimation de la concentration de ces deux espèces serait due à la présence importante de l'atome d'hydrogène qui faciliterait la recombinaison de C_2H_4 et C_3H_6 avec H pour former respectivement les radicaux éthyle et propyle.

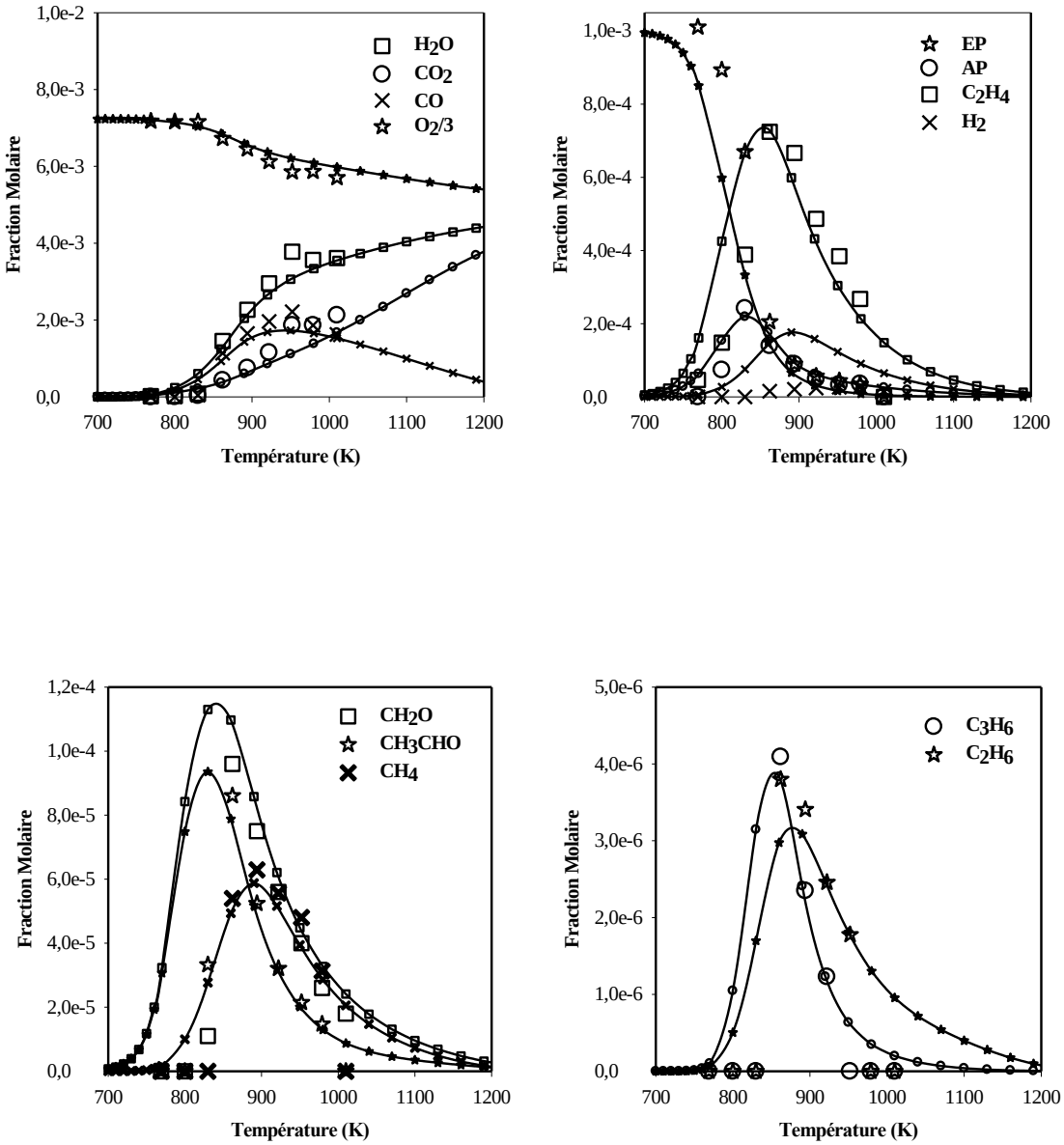


Figure V-8 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de EP, 21700 ppm de O_2, φ=0,3 ; τ=0,7 s

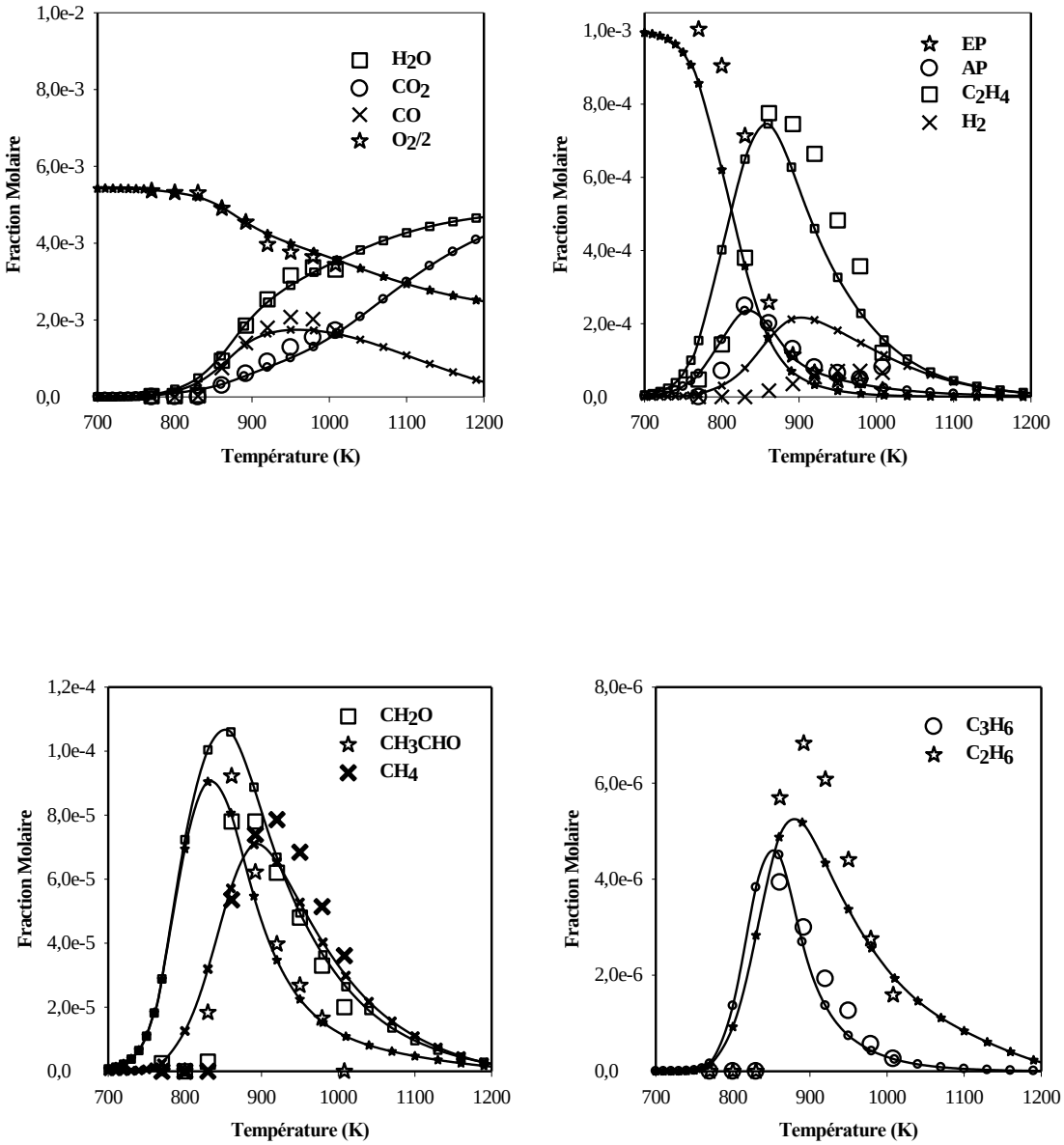


Figure V-9 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de EP, 10850 ppm de O_2, φ=0,6 ; τ=0,7 s

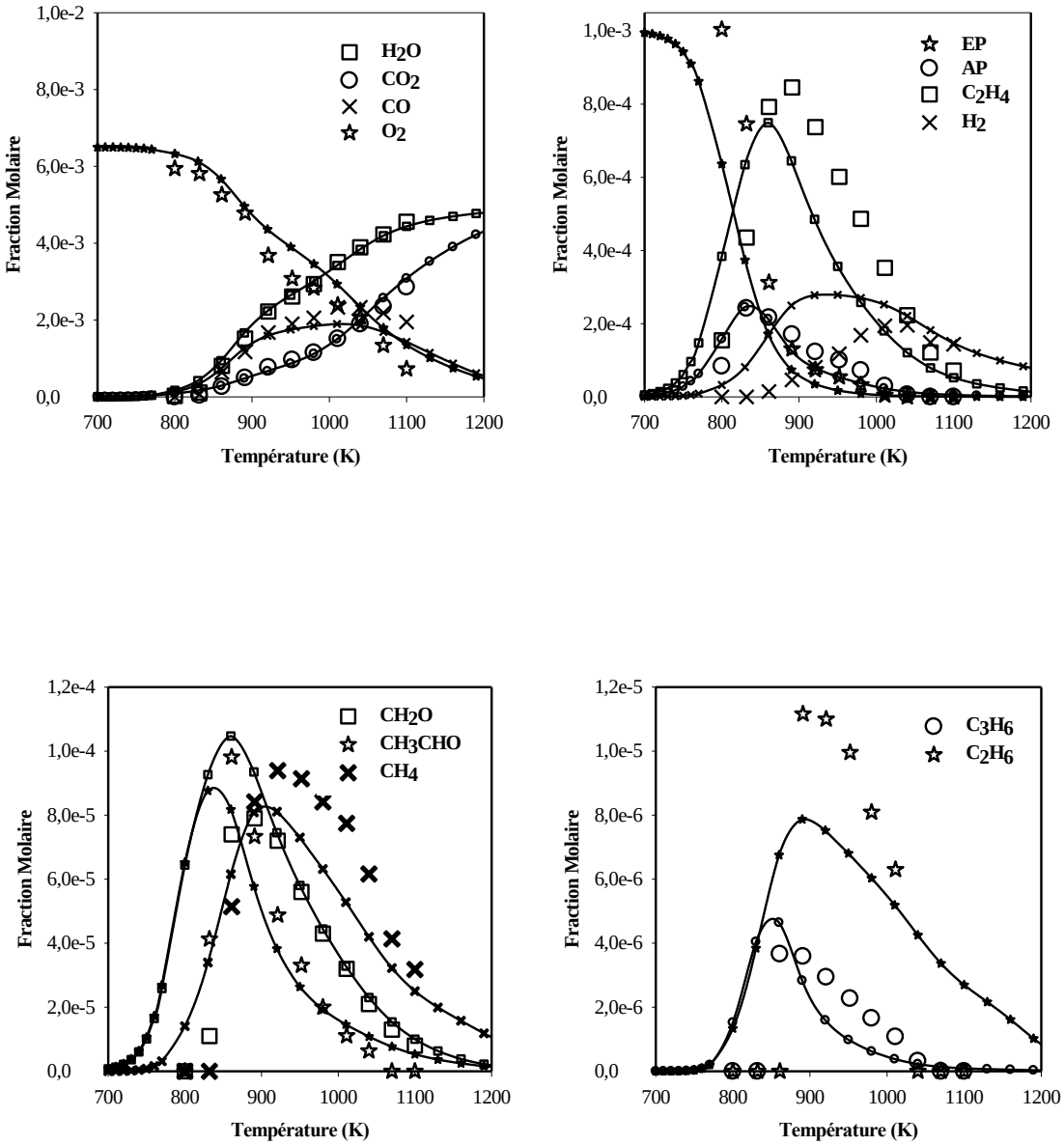


Figure V-10 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de EP, 6500 ppm de O_2, φ=1 ; τ=0,7 s

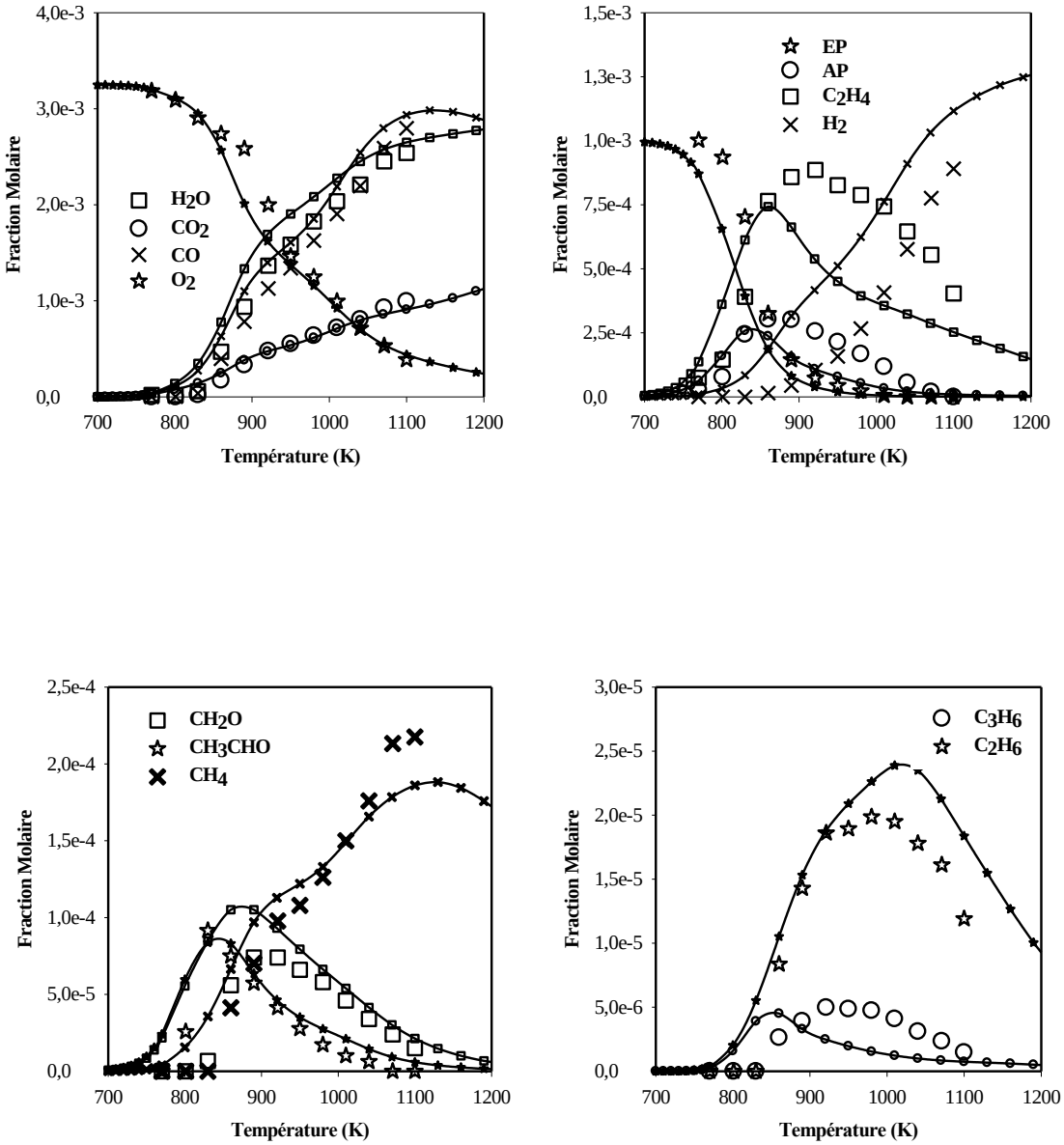


Figure V-11 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de EP, 3250 ppm de O_2, φ=2 ; τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Maintenant que nous avons vu que le modèle reproduisait de manière convenable l'oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité, nous avons effectué une analyse de voies réactionnelles afin de déterminer les chemins de dégradation préférentiels de l'hydrocarbure initial. La figure V-12 indique les voies de dégradation du propanoate d'éthyle à 920 K et à φ=1. Dans ces conditions, on constate que le propanoate d'éthyle est consommé par des réactions de métathèse avec les radicaux H, OH et HO_2, mais surtout par décomposition moléculaire. Cette réaction de décomposition constitue la voie principale (52,8%) de consommation du propanoate d'éthyle, formant ainsi deux des espèces intermédiaires majoritaires (éthylène et acide propanoïque) mesurées expérimentalement.

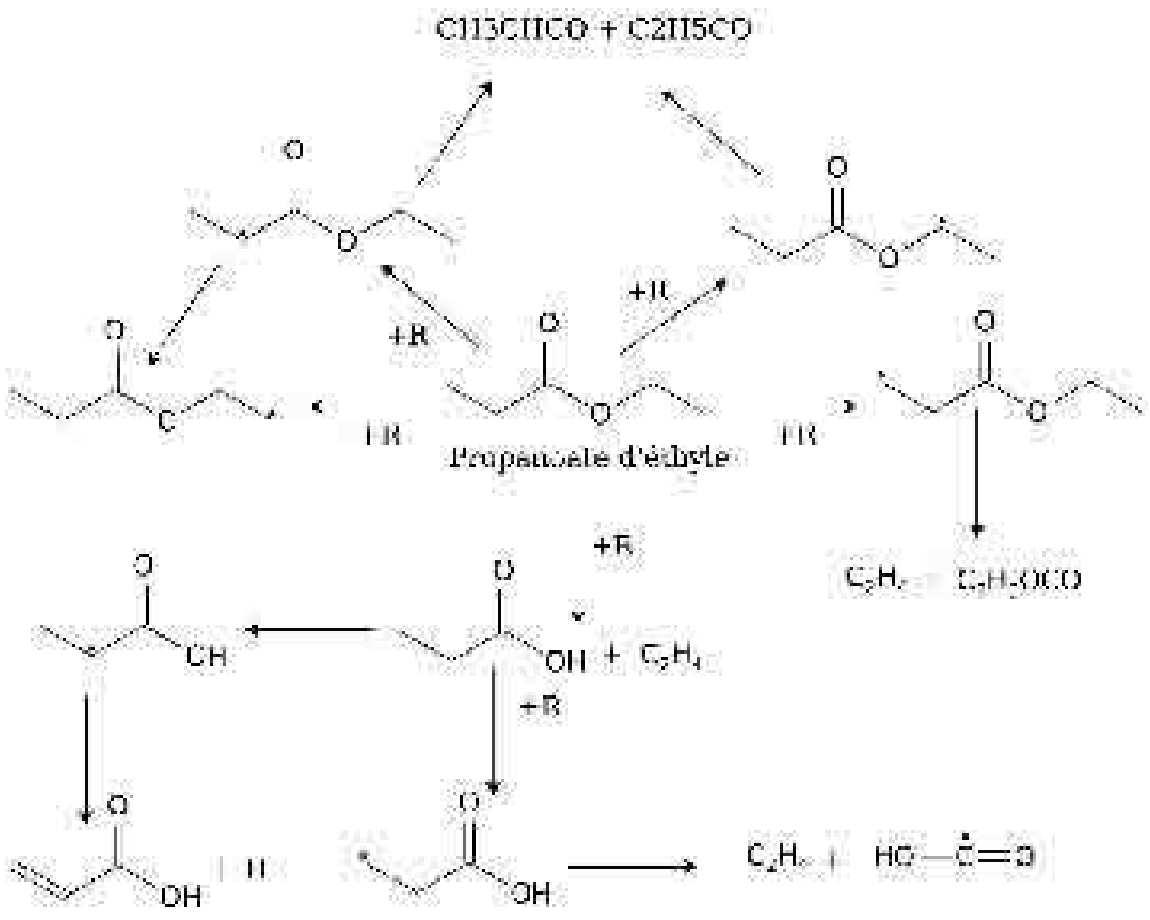


Figure V-12 : Voies de dégradation principales du butanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange propanoate d'éthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=920 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à une richesse de 1 afin de déterminer les réactions auxquelles le profil du propanoate d'éthyle est le plus sensible. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V-13 pour les réactions les plus importantes.

Les réactions les plus sensibles sont les réactions de décomposition unimoléculaire (R668) et de métathèse du propanoate d'éthyle avec les radicaux H, OH et HO_2 (R679, R680, R686-R689, R695, R696). Toutes ces réactions présentent des coefficients de sensibilité négatifs. L'influence de la réaction EP (+M) $\rightleftarrows C_2H_5COOH + C_2H_4$ (+M) (R688) augmente continuellement avec la température. Cette augmentation continue du coefficient de sensibilité montre que le propanoate d'éthyle se décompose principalement par cette réaction. Les réactions de métathèse favorisent également la consommation de l'hydrocarbure initial, mais beaucoup moins que la réaction 668. Une autre réaction importante dans cette analyse de sensibilité est la réaction $CH_3CHCOOH \rightleftarrows C_2H_3COOH + H$.

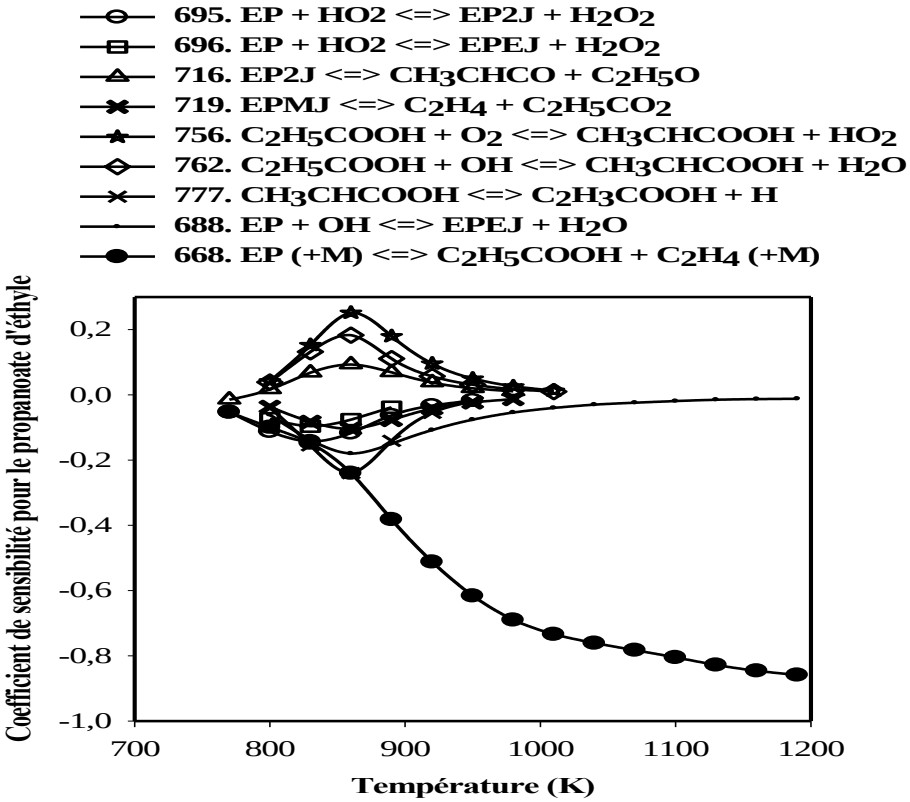


Figure V-13 : Coefficients de sensibilité pour le propanoate d'éthyle lors de l'oxydation du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité à 10 atm et φ=1

d) Comparaison des réactivités de l'oxydation du butanoate de méthyle et du propanoate de méthyle

A l'issue de cette étude menée sur l'oxydation du propanoate d'éthyle, nous avons comparé l'évolution des fractions molaires du propanoate d'éthyle à celles du butanoate de méthyle (les deux composés sont des isomères) avec la température, l'oxydation des deux composés étant étudiée dans les mêmes conditions expérimentales. La figure V-14 présente les résultats observés lors des deux études. Il apparaît que le propanoate d'éthyle est consommé plus rapidement que le butanoate de méthyle quelque soit la richesse. Les mêmes observations et les mêmes conclusions sont obtenues par Hakka MH et al [4] en 2009 qui ont étudié en réacteur auto-agité et en tube à choc l'oxydation des butanoates d'éthyle et de méthyle. Ces observations et conclusions sont également corroborées par les travaux en moteur CFR de Zhang et al [5] en 2009 portant sur l'oxydation de 4 esters méthyliques (nonanoate de méthyle, non-2-énoate de méthyle, non-3-énoate de méthyle et nonanoate d'éthyle) et de Zhang et Boehman [6] en 2010 lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle et de l'hexanoate d'éthyle.

Par ailleurs, on remarque que l'écart de réactivité est plus marqué avec l'augmentation de la richesse. Les analyses de voies réactionnelles effectuées ont montré, d'une part, que le propanoate de méthyle est essentiellement consommé par la réaction de décomposition moléculaire EP (+M) $\rightleftarrows$ $C_2H_5COOH + C_2H_4$ (+M) et d'autre part que le butanoate de méthyle est, quant à lui, consommé par les réactions de métathèse avec les radicaux H, OH et HO_2. La richesse augmentant (moins d'oxygène dans le mélange réactif initial), moins nous produisons ces radicaux qui favorisent la consommation du butanoate de méthyle, contrairement au propanoate d'éthyle dont la consommation est favorisée par augmentation de la température. C'est ce qui pourrait expliquer l'écart de réactivité des deux réactifs avec l'augmentation de la richesse

.

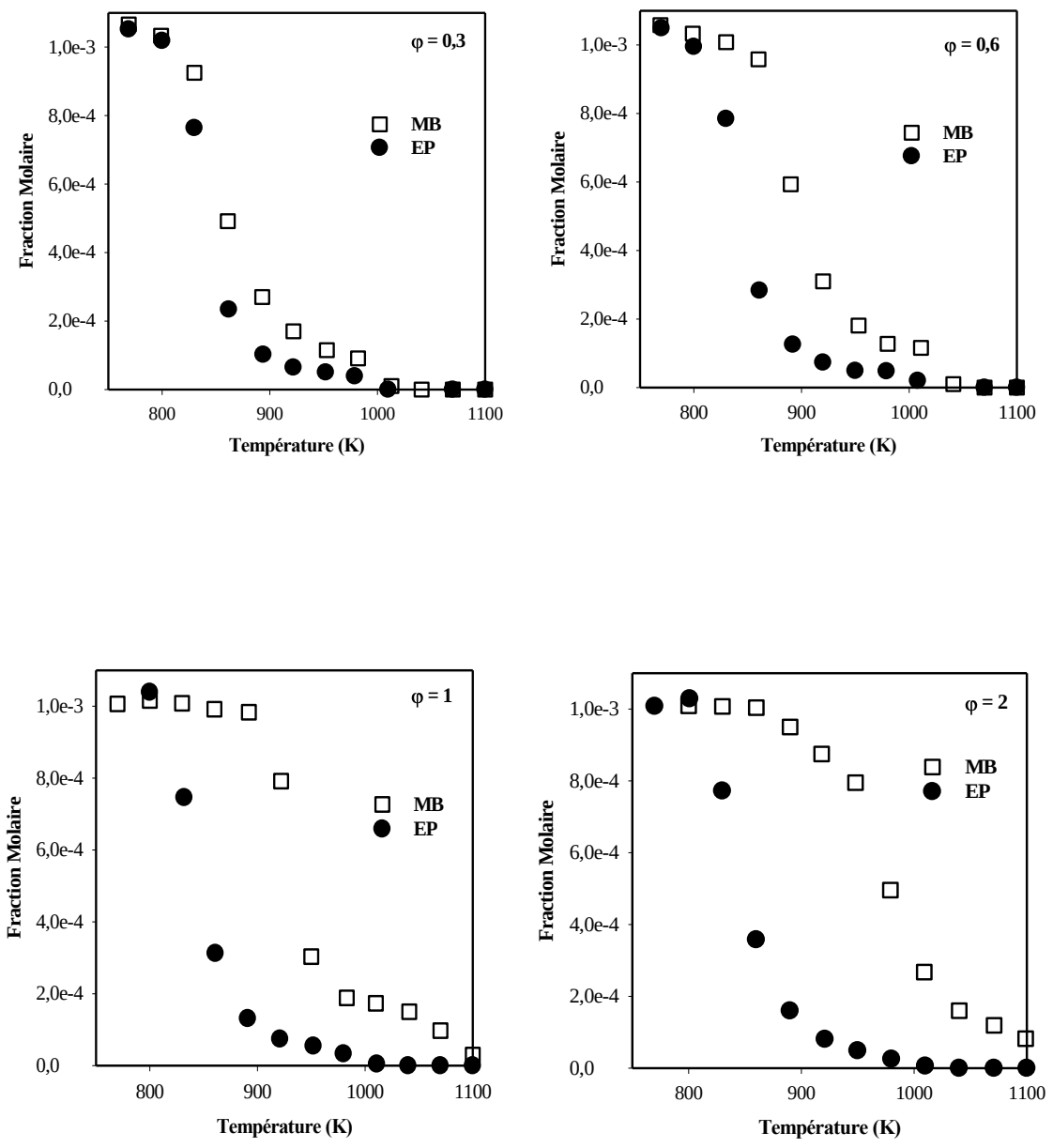


Figure V-14 : Comparaison des réactivités du butanoate de méthyle et du propanoate d'éthyle en réacteur auto-agité dans les conditions expérimentales

1.3. Oxydation du pentanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du pentanoate de méthyle a été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression dans un large domaine de température et de richesse dans les conditions regroupées dans le tableau V-3

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MPE} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$13{,}30.10^{-3}$	$9{,}857.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$8{,}00.10^{-3}$	$9{,}910.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$4{,}00.10^{-3}$	$9{,}950.10^{-1}$	2	770-1160

Tableau V-3 : Oxydation du pentanoate de méthyle (MPE) en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les expériences réalisées en réacteur auto-agité en oxydant le pentanoate de méthyle nous ont permis d'obtenir l'évolution en fonction de la température des réactifs, produits et principales espèces intermédiaires stables.

Les produits majoritaires d'oxydation du pentanoate de méthyle sont comme pour le butanoate de méthyle, CO, CO_2, H_2O, CH_4, C_2H_4, CH_2O et H_2. Nous avons également détecté l'éthane, le propène et le but-1-ène, mais en faible quantité.

c) Confrontation modèle-expérience

Les figures V-15 à V-17 présentent les résultats des simulations (lignes et petits symboles) et ceux des expériences (grands symboles).

On peut constater que le modèle représente convenablement les résultats expérimentaux quelque soit la richesse. Le modèle représente correctement la consommation du pentanoate de méthyle. Les valeurs de la plupart des intermédiaires sont correctement estimées ; les produits de fin de combustion (CO_2, CO, H_2O) sont également bien reproduits. Cependant, à φ=2, le profil de fractions molaires de l'hydrogène est surestimé et celui de l'eau est sous-estimé. Les esters insaturés, qui font partie des espèces caractéristiques de l'oxydation du pentanoate de méthyle sont également bien estimés par le mécanisme.

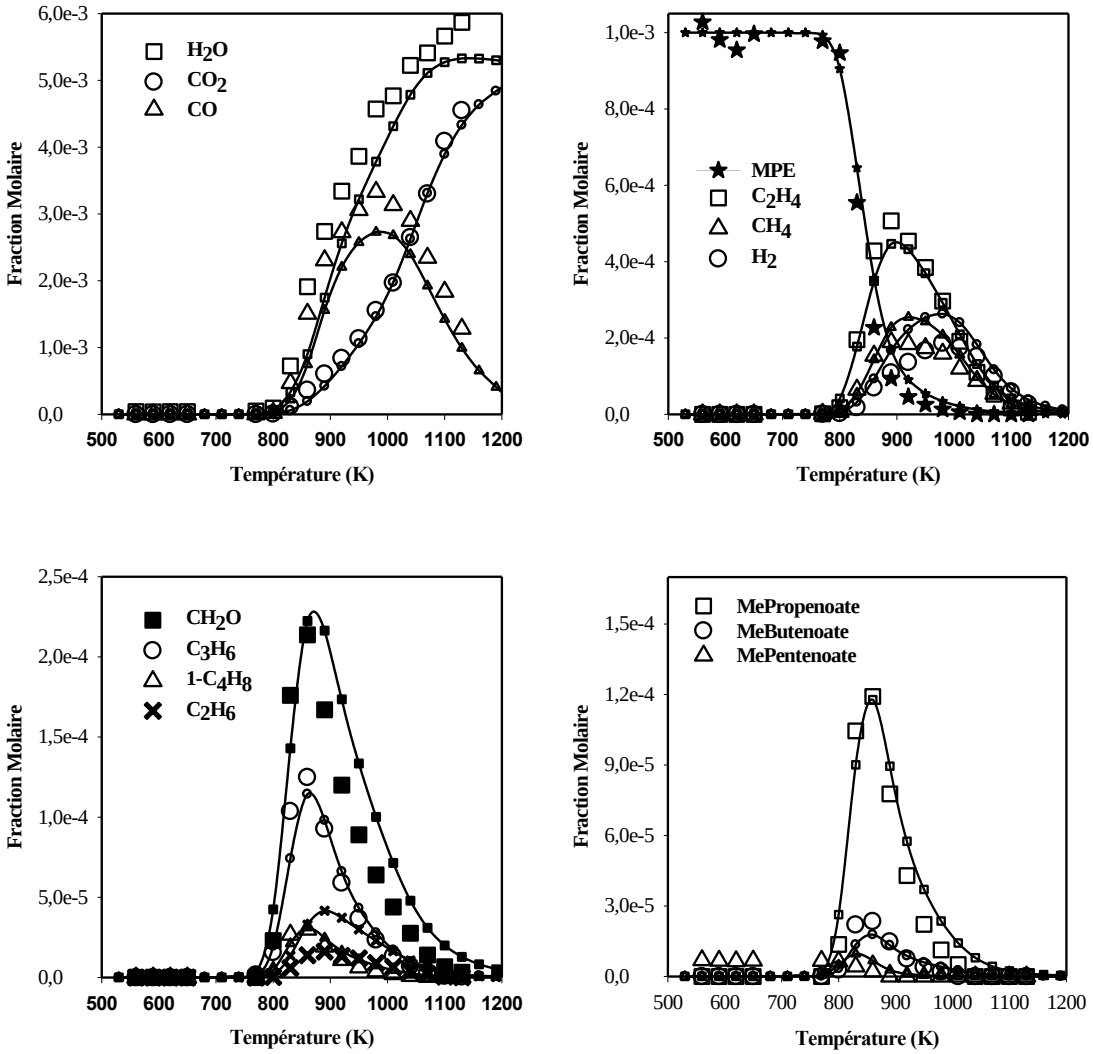


Figure V-15 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MPE, 13300 ppm de O_2, φ=0,6 ; τ=0,7 s

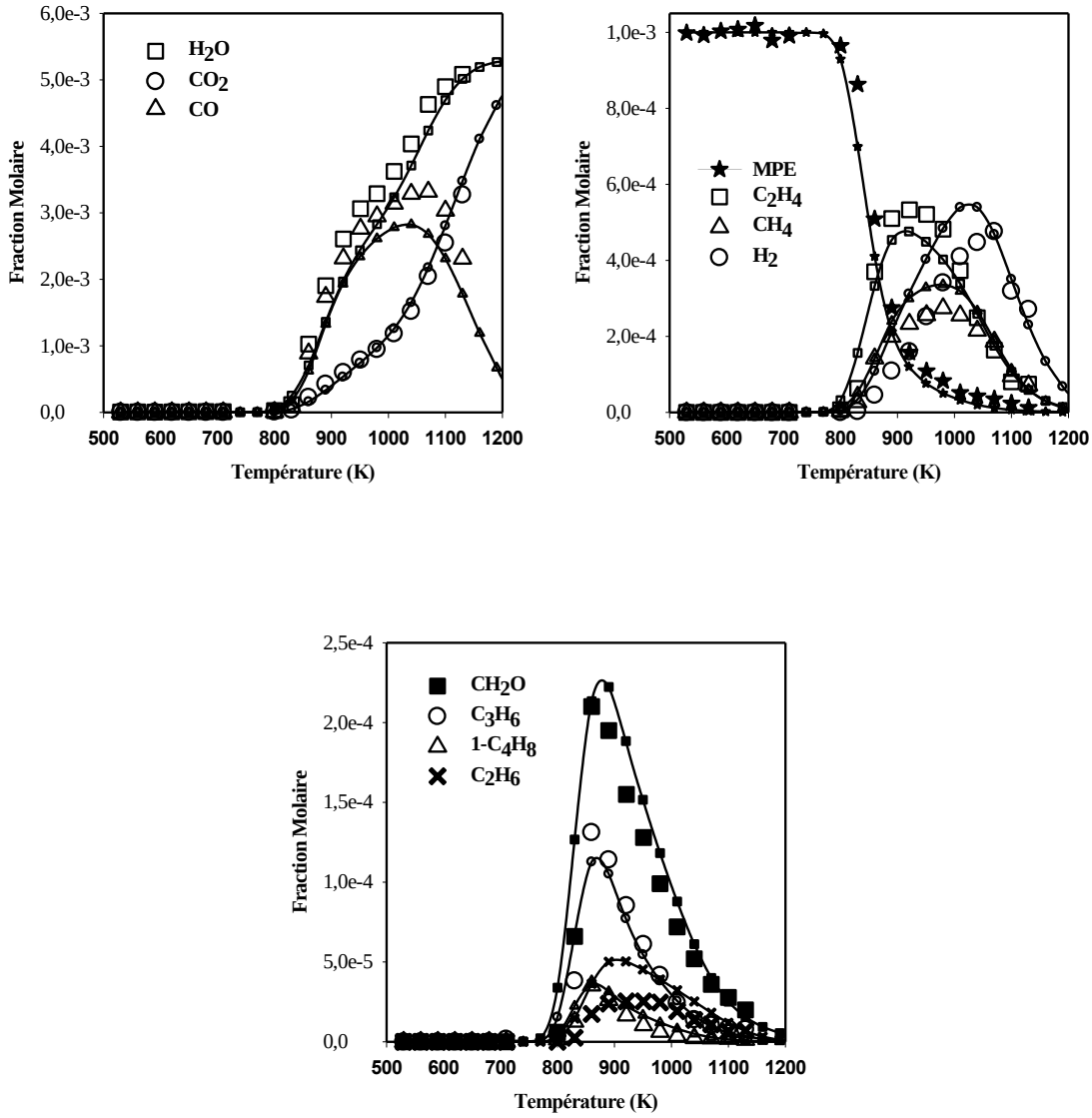


Figure V-16 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MPE, 8000 ppm de O_2, φ=1 ; τ=0,7 s

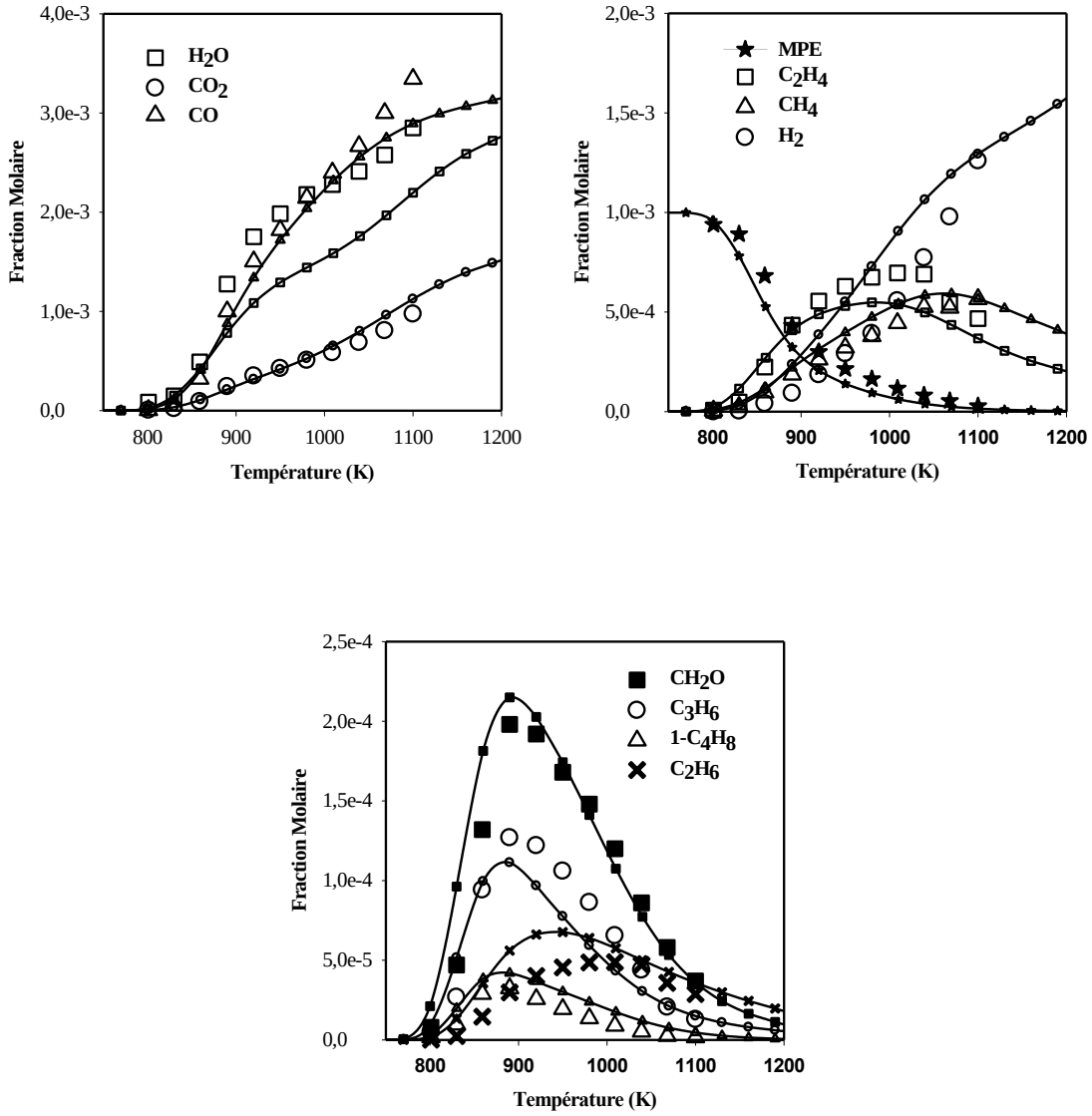


Figure V-17 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MPE, 4000 ppm de O_2, φ=2 ; τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) pour déterminer les principales voies de dégradation du pentanoate de méthyle. Les principales voies de dégradation de l'hydrocarbure à T=950 K et à un temps de passage de 0,7 s sont représentées sur la figure V-18.

A 950 K, le pentanoate de méthyle réagit par des réactions de métathèse avec les radicaux H, OH et HO_2 pour former des radicaux MPEXJ, et en majorité le radical MPE2J. Ces radicaux vont ensuite à leur tour subir différentes étapes constituées principalement par des réactions d'isomérisation permettant la redistribution des isomères et des réactions de décomposition par rupture de liaison C-C. Ainsi MPE5J va se décomposer en C_2H_4 et MP3J qui subit à son tour une réaction d'oxydation pour former le prop-2-énoate de méthyle. MPE4J réagit quasi-totalement par rupture de liaison C-C pour former le propène et le radical ME2J. Ce dernier radical ME2J va se décomposer à son tour pour former CH_2CO et CH_3O. MPE3J se décompose de deux manières : il forme soit le radical méthyle et le but-3-énoate de méthyle, soit le but-1-ène et le radical CH_3OCO. Enfin MPEMJ se décompose en CH_2O et nC_3H_7CO.

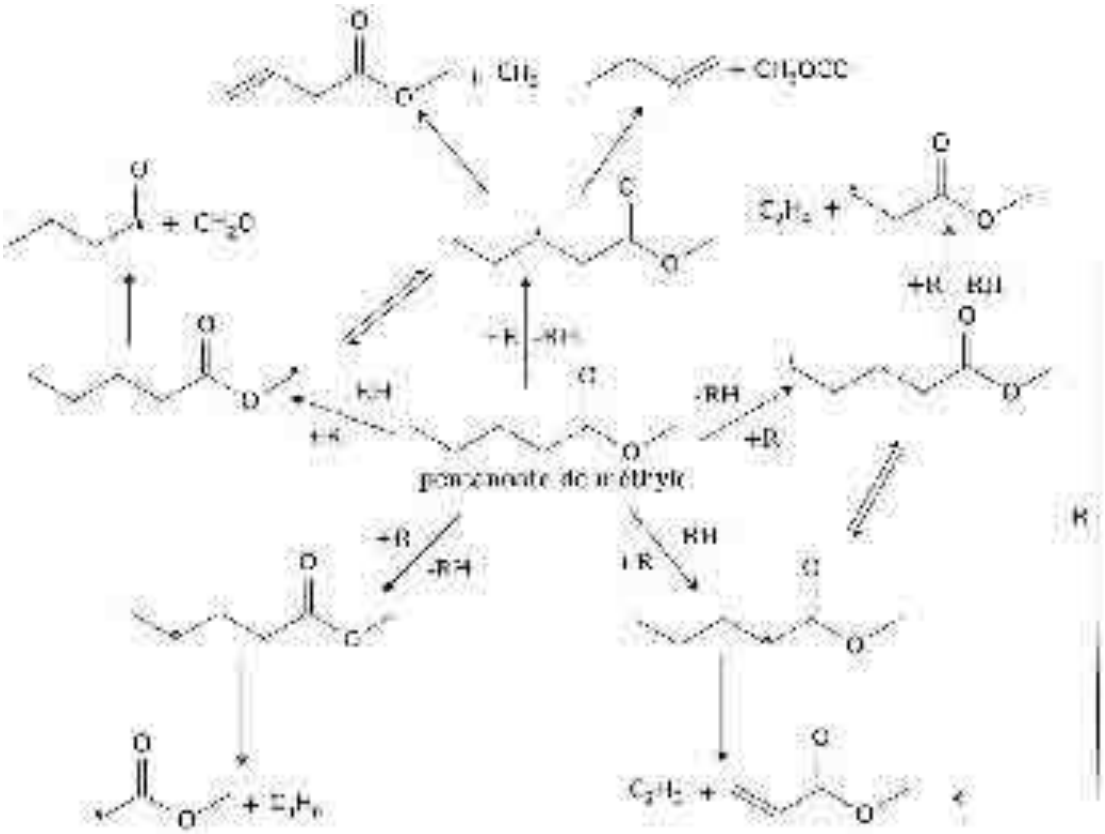


Figure V-18 : Voies de dégradations principales du pentanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange pentanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à la stoechiométrie (φ=1,0) et à haute pression

(10 atm) et 950 K grâce au modèle. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V-19 pour les réactions les plus importantes.

Dans ces conditions, les réactions les plus importantes et qui concernent directement l'hydrocarbure, sont les réactions de métathèse avec les radicaux H (MPE + H ⇄MPE2J + H_2) et OH (MPE + OH ⇄MPE2J + H_2O). Une autre réaction sensible est celle entre les radicaux méthyle et hydroperoxyle (CH_3 + HO_2 ⇄CH_4 + O_2) avec un coefficient de sensibilité positif. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction CH_3 + HO_2 ⇄CH_3O + OH. La réaction HO_2 + OH <=> H_2O + O_2 présente un coefficient de sensibilité positif et son effet est non négligeable : elle transforme 2 radicaux, dont un est très réactif, en 2 molécules stables.

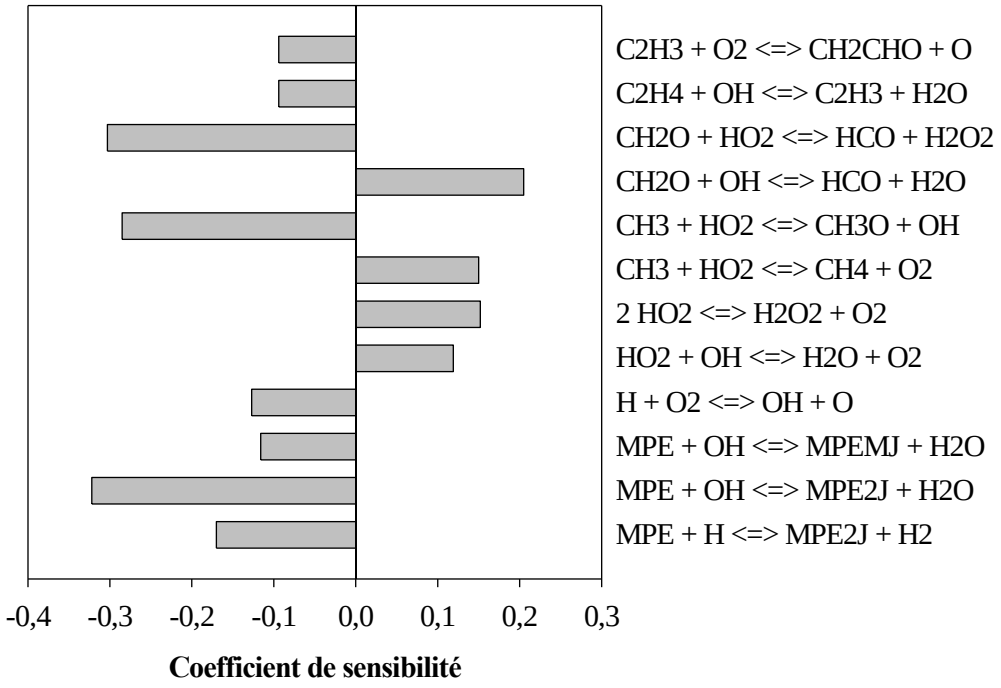


Figure V-19 : Coefficient de sensibilité pour le pentanoate de méthyle lors de l'oxydation du pentanoate de méthyle en réacteur à T=950 K, à 10 atm et φ=1

1.4. Oxydation de l'hexanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

L'hexanoate de méthyle a déjà été étudié en réacteur auto-agité par Dayma *et al.* [7] dans différentes conditions expérimentales, le temps de passage des gaz dans le réacteur étant fixé à 1 s. Nous avons repris les expériences sur le même composé, mais en fixant le temps de passage des gaz dans le réacteur à 0,7 s. Les conditions expérimentales pour notre étude, sont résumées dans le tableau V-4.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MHX} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}50.10^{-3}$	$9{,}895.10^{-1}$	1	770-1190
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$4{,}75.10^{-3}$	$9{,}943.10^{-1}$	2	770-1190

Tableau V-4 : Oxydation de l'hexanoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Lors de l'oxydation de l'hexanoate de méthyle nous avons suivi l'évolution en fonction de la température des réactifs, de différents produits et espèces intermédiaires. Ainsi, nous avons mesuré les concentrations de l'oxygène, de l'hexanoate de méthyle, de l'eau, du monoxyde de carbone, du dioxyde de carbone, du formaldéhyde, de l'acétaldéhyde, du méthane, de l'éthane, de l'éthylène, du propène, de l'acétylène, du but-1-ène, du pent-1-ène, du 1,3-buta-1,3-diène, de l'hydrogène et de très faibles quantités d'esters méthyliques insaturés (prop-2-énoate de méthyle, but-3-énoate de méthyle, pent-4-énoate de méthyle). La nature de toutes ces espèces est en bon accord avec celle mesurées dans les études antérieures sur l'oxydation de l'hexanoate de méthyle réalisées par Dayma *et al.* [7].

c) Confrontation modèle-expérience

Sur les figures V-20 (φ=1) et V-21 (φ=2), sont présentées les profils expérimentaux (grands symboles) et simulés (traits et petits symboles) des réactifs et des espèces identifiées.

A la stoechiométrie (φ=1), le modèle reproduit correctement les profils de toutes les espèces identifiées, à l'exception du 1-butène qui est sous-estimé par le modèle.

Sur la figure V-21, on peut observer que le modèle reproduit également d'une manière convenable les quantités des espèces identifiées. Cependant, le modèle est légèrement plus réactif entre 800 et 900 K, ce qui crée un écart de 30 K entre les profils expérimentaux et simulés de l'hexanoate de méthyle. Les quantités d'éthylène et de but-1-ène sont également sous-estimées par le modèle.

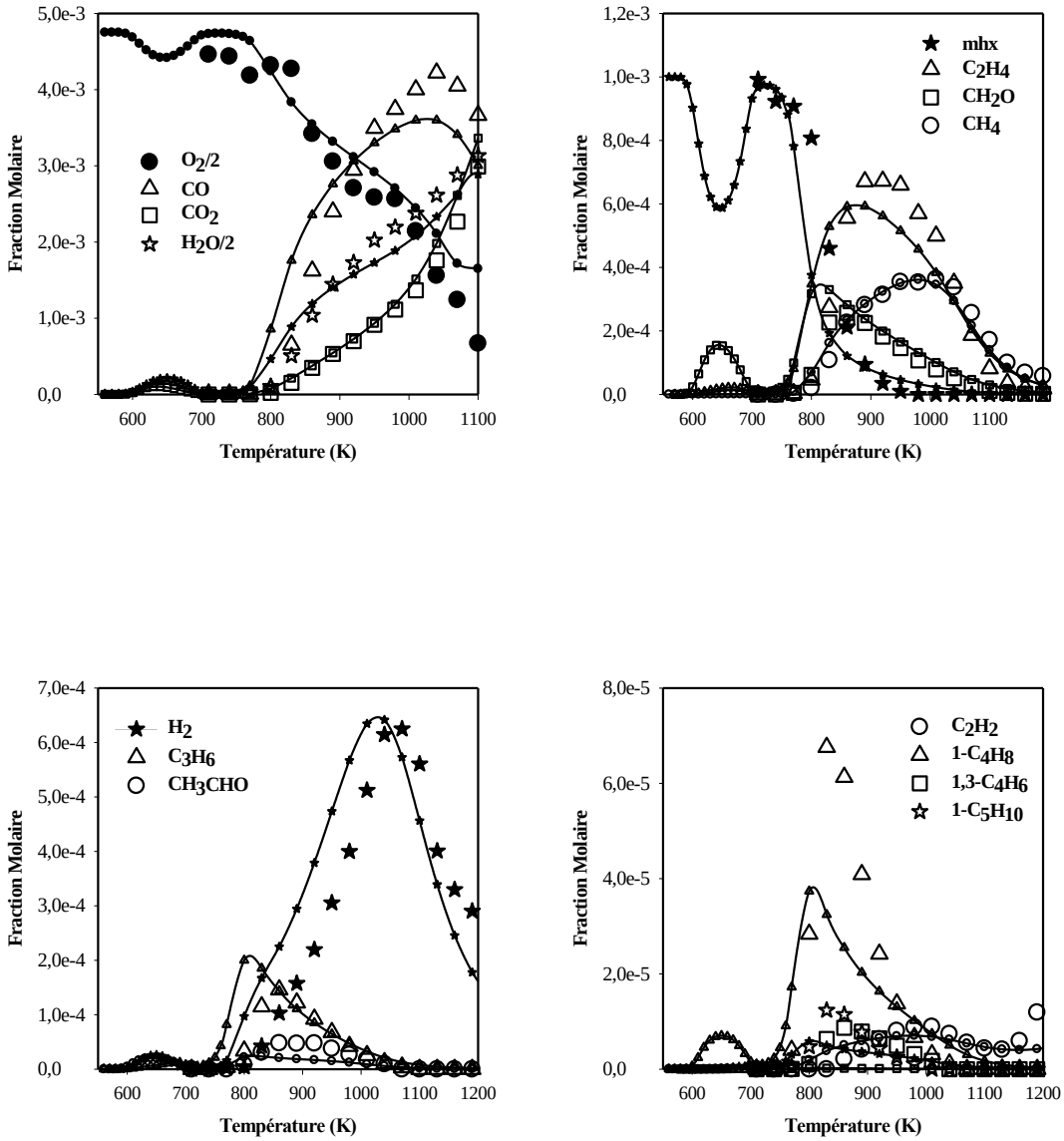


Figure V-20 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MHX, 9500 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

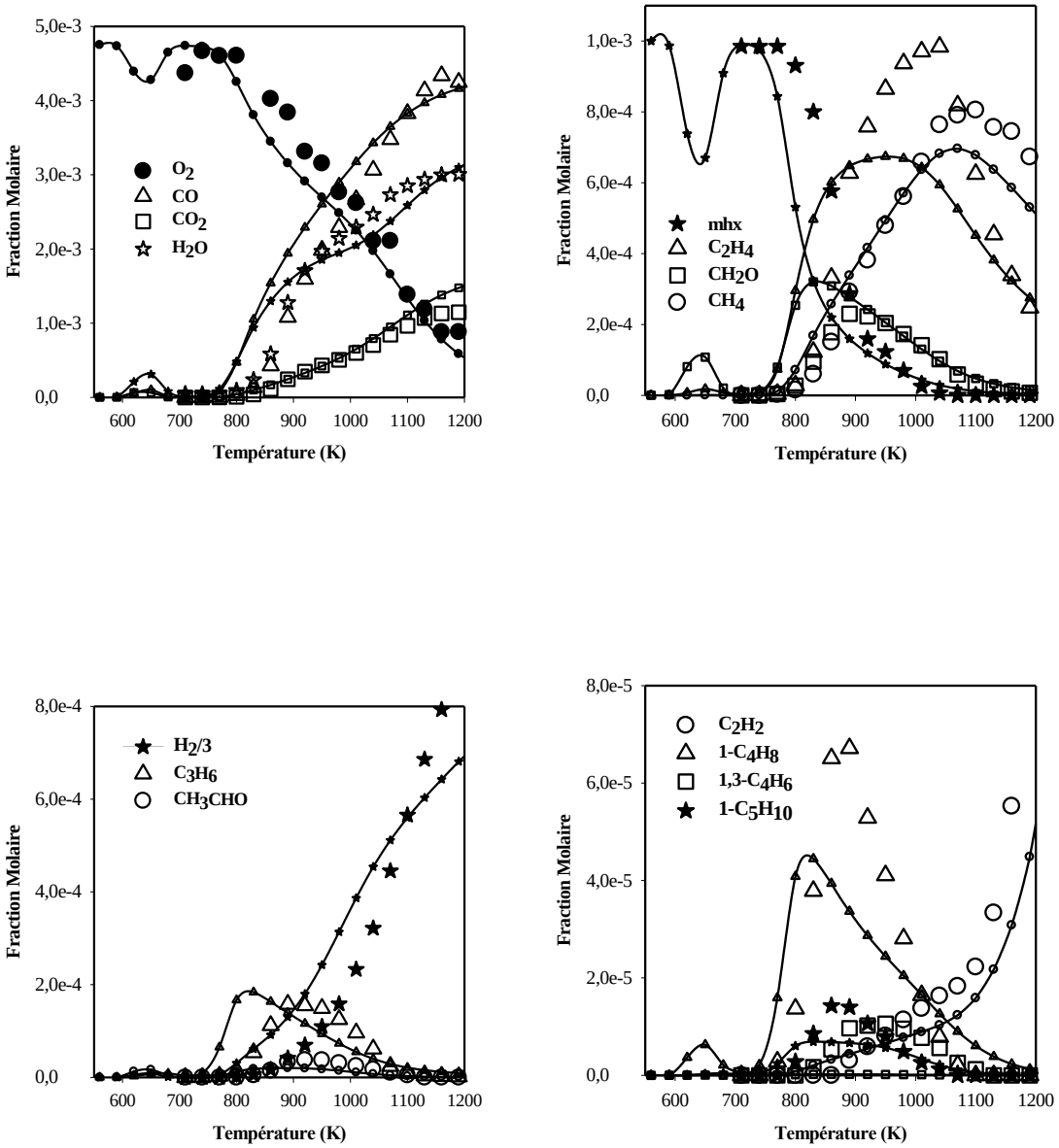


Figure V-21 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000ppm de MHX, 4750 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) pour déterminer les principales voies de dégradation de l'hexanoate de méthyle. Les principales voies de dégradation de l'hydrocarbure à T=950 K et à un temps de passage de 0,7 s sont représentées sur la figure V-22.

Dans ces conditions, l'hexanoate de méthyle réagit par des réactions de métathèse avec les radicaux H, OH et HO_2 pour former des radicaux ester-alkyles, notamment le radical MHX2J (cf. figure V-22). Ces radicaux vont ensuite à leur tour subir différentes étapes de dégradation constituées principalement par des réactions d'isomérisation permettant la redistribution des isomères et des réactions de décomposition par rupture de liaison C-C. Ainsi MHX6J va se décomposer en C_2H_4 et MB4J qui va ensuite perdre un atome d'hydrogène pour former le but-3-énote de méthyle. D'une part, MHX5J se décompose en C_3H_6 et MP3J qui se décompose à son tour en C_2H_4 et CH_3OCO, et d'autre part, MHX5J subit une isomérisation pour former MHX2J via un état de transition à 5 centres. MHX4J réagit quasi-totalement par rupture de liaison C-C pour former le 1-butène et le radical ME2J. MHX3J se décompose de deux manières, soit pour former le radical éthyle et du but-3-enoate de méthyle, soit pour former 1-C_5H_{10} et CH_3O-C=O.

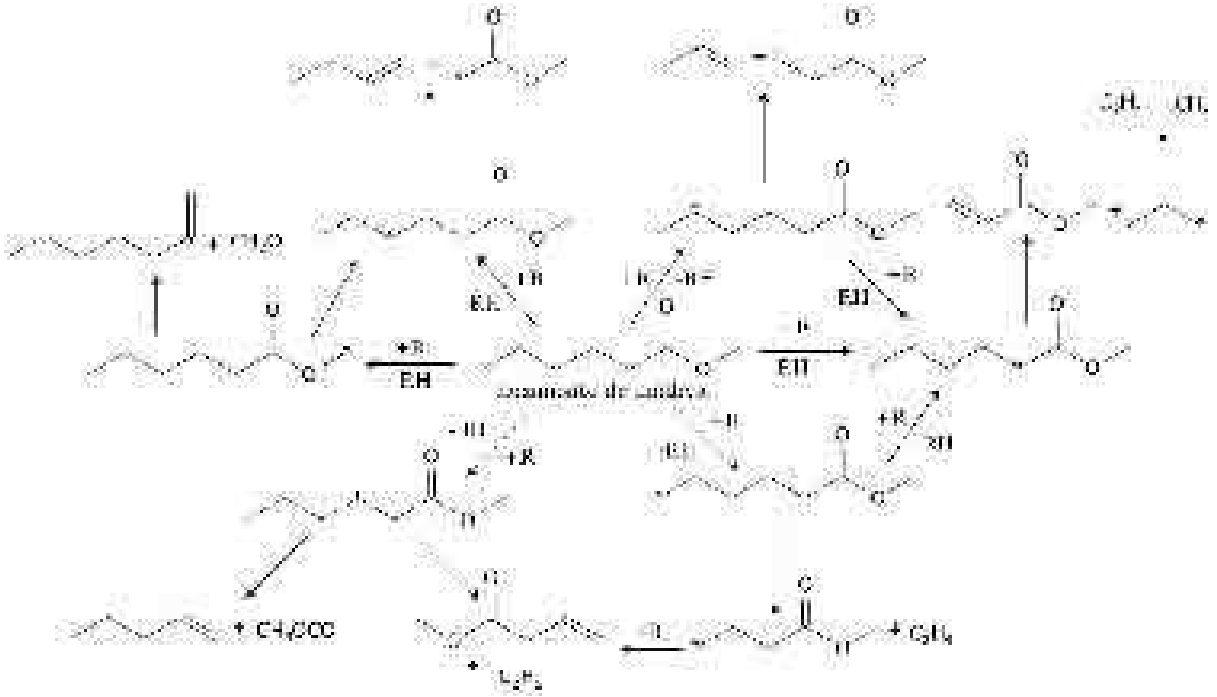


Figure V-22 : Voies de dégradations principales de l'hexanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange hexanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) grâce au modèle. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure V-23 pour les réactions les plus importantes.

Dans ces conditions, les réactions les plus importantes faisant intervenir directement l'hydrocarbure, sont les réactions de métathèse avec les radicaux H (MHX + H ⇄MHX2J + H_2) et OH (MHX + OH ⇄MHX2J + H_2O). Une autre réaction sensible est celle entre les radicaux méthyle et hydroperoxyle (CH_3 + HO_2 ⇄CH_4 + O_2) avec un coefficient de sensibilité positif. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction (CH_3 + HO_2 ⇄CH_3O + OH), le coefficient de sensibilité de ces deux réactions sont presque identique mais de signes contraires. La réaction HO_2 + OH ⇄H_2O + O_2 présente un coefficient de sensibilité positif : elle transforme 2 radicaux, dont un est très réactif, en 2 molécules stables. La réaction H + O_2 (+M) ⇄HO_2 (+M) présente également un coefficient de sensibilité positif, elle consomme un atome d'hydrogène H pour former un radical hydroperoxyle (HO_2) moins réactif. Ces deux réactions entraînent une baisse de réactivité.

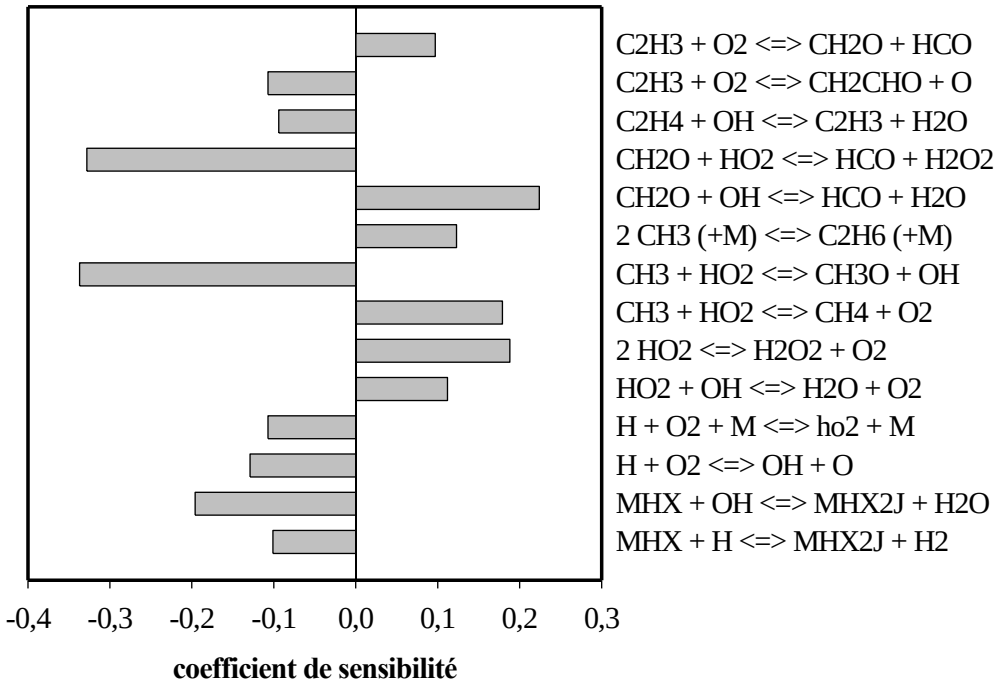


Figure V-23 : Coefficient de sensibilité pour l'hexanoate de méthyle lors de l'oxydation de l'hexanoate de méthyle en réacteur à T=950 K, à 10 atm et φ=1

1.5. Oxydation de l'heptanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

L'oxydation de l'heptanoate de méthyle a été étudiée en réacteur auto-agité dans des conditions récapitulées dans le tableau V-5.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MHP} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$18{,}30.10^{-3}$	$9{,}807.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$11{,}00.10^{-3}$	$9{,}880.10^{-1}$	1	560-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$5{,}50.10^{-3}$	$9{,}935.10^{-1}$	2	770-1160

Tableau V-5 : Oxydation de l'heptanoate de méthyle (MHP) en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Dans ces conditions, nous observons d'une part une réactivité à basse température entre 560 et 760 K caractérisée par une zone de flamme froide (560-660 K) et une zone de coefficient négatif de température (660-760 K) et d'autre part une réactivité à haute température (>760 K). Les différents profils des réactifs, des produits et principaux intermédiaires stables sont présentés sur les figures V-24 à V-26.

Les produits majoritaires d'oxydation de l'heptanoate de méthyle sont principalement comme pour l'hexanoate de méthyle CO, CO_2, H_2O, CH_2O, CH_4, C_2H_4, C_3H_6 et H_2. Ceux en faible quantité sont le but-1-ène, le pent-1-ène, l'éthane et le méthanol. On peut noter que les concentrations des alcènes diminuent avec l'augmentation du nombre d'atome de carbone. Ainsi l'éthylène est l'alcène le plus abondant.

c) Confrontation modèle-expérience

Sur les figures V-24 (φ=0,6), V-25 (φ=1) et V-26 (φ=2), sont présentées les confrontations entre les résultats des simulations et ceux obtenus expérimentalement. Il apparaît que le modèle reproduit convenablement le profil de l'heptanoate de méthyle.

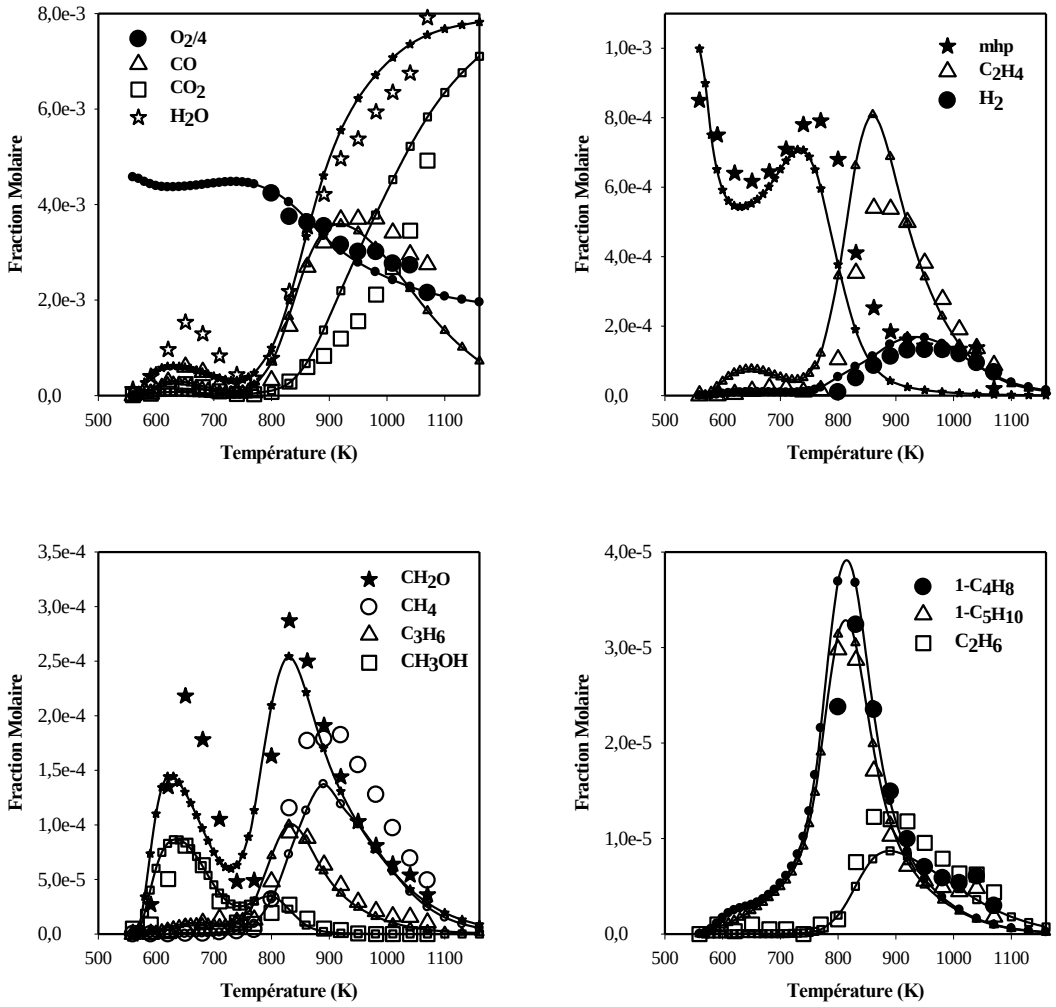


Figure V-24 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MHP, 18300 ppm de O_2, φ=0,6, τ=0,7 s

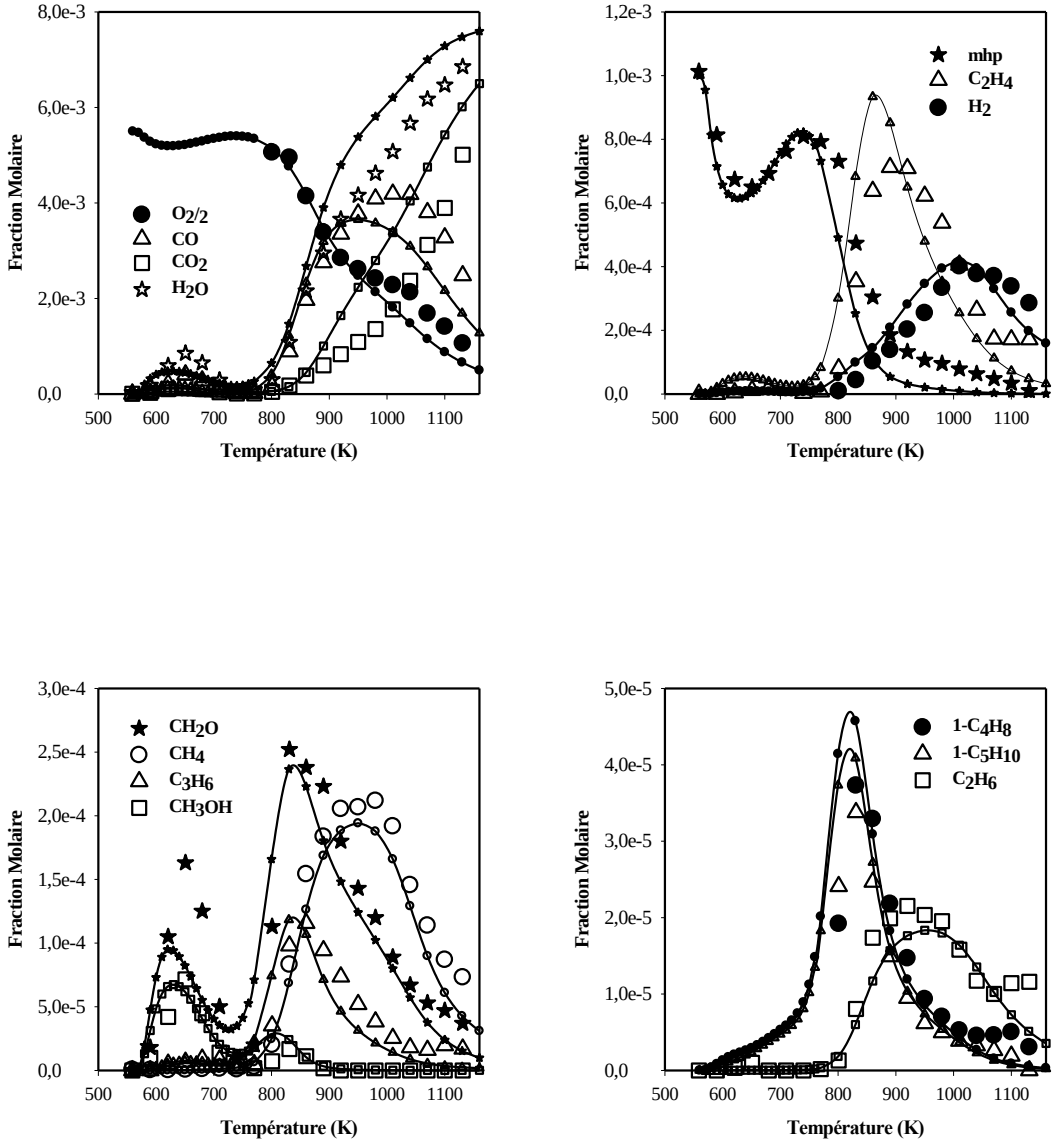


Figure V-25 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MHP, 11000 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

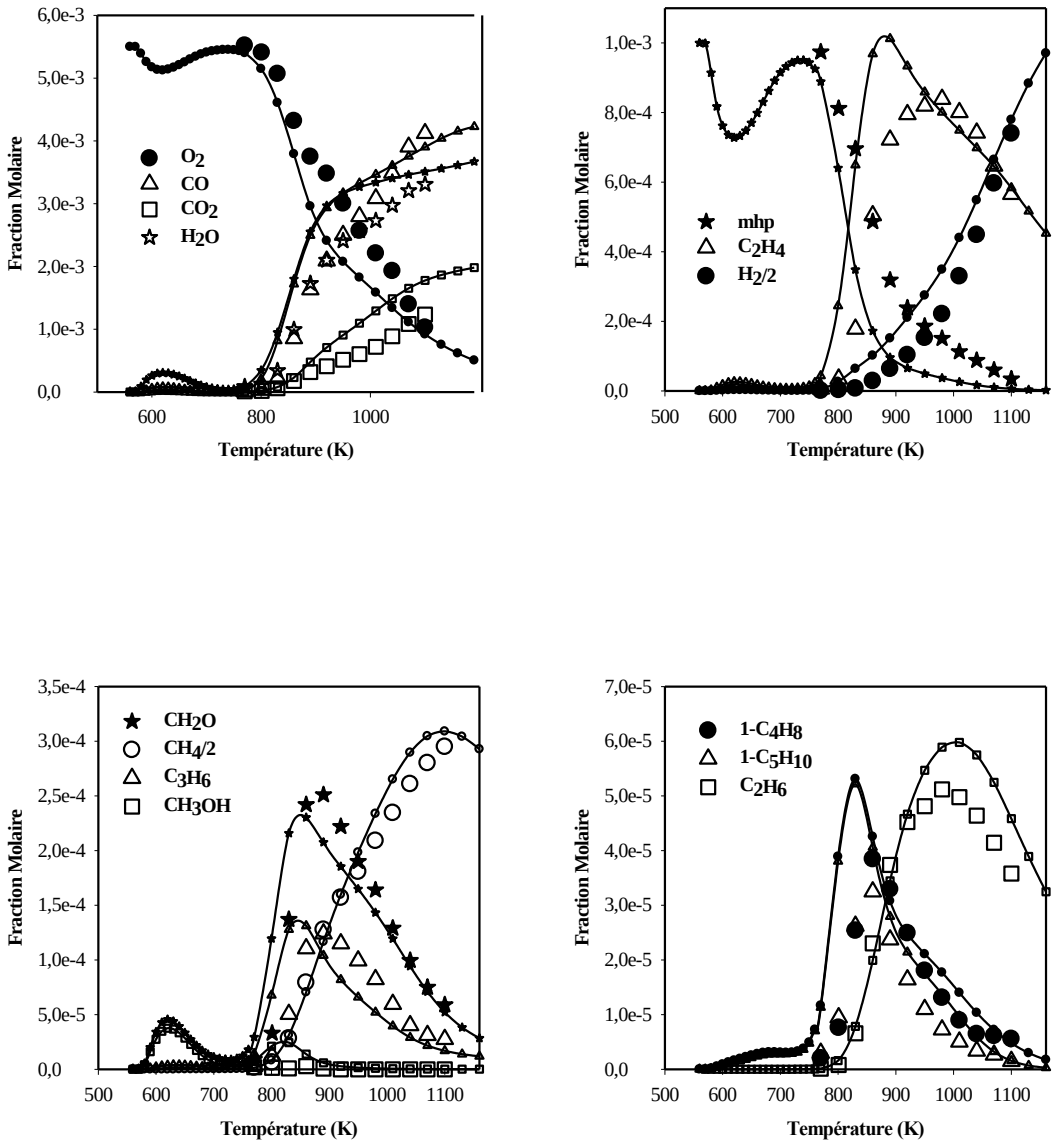


Figure V-26 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MHP, 5500 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse afin de dégager les voies de dégradation importantes de l'heptanoate de méthyle. Cette analyse a été faite à 10 atm, pour une richesse de 1,0 et pour des températures de 620 K et 950 K.

1. Les voies de décomposition de l'heptanoate de méthyle à 620 K sont représentées sur la figure V-27. Seules les grandes familles des espèces dérivées sont prises en compte dans ce schéma réactionnel. Dans ces conditions, l'heptanoate de méthyle réagit principalement par des réactions de métathèse avec les radicaux OH et CH_3O pour former les différents radicaux MHPXJ, en particulier le radical MHP2J (respectivement 28% et 16%). Ces radicaux vont alors majoritairement (>83%) s'additionner sur une molécule d'oxygène pour former des radicaux ester-peroxy-alkyles RO_2 (MHPXOO). Les autres possibles voies réactionnelles importantes de ces radicaux sont les réactions d'isomérisation et d'oxydation. Les radicaux RO_2 s'isomérisent majoritairement pour former des radicaux ester-hydroperoxy-alkyles QO_2H. Ces nouveaux radicaux réagissent ensuite principalement par des réactions d'addition sur l'oxygène moléculaire (11%) et des réactions de formation des éthers cycliques (67%). Il est à noter que ces éthers cycliques sont préférentiellement formés avec le carbone 2, ce qui explique la formation du prop-2-énoate de méthyle.

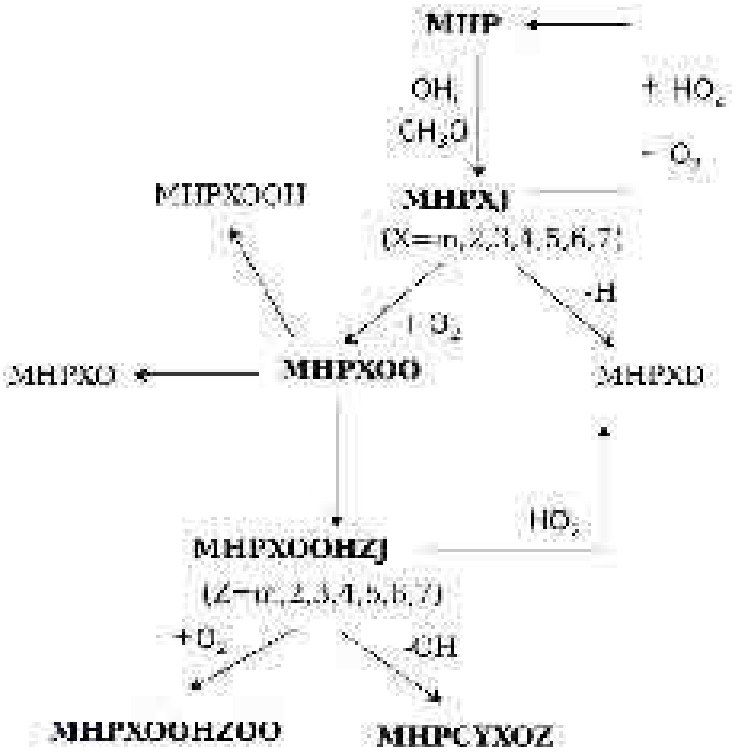


Figure V-27 : Voies de dégradations principales de l'heptanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange heptanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=620 K

2. Le schéma de dégradation de l'heptanoate de méthyle à 950 K est présenté sur la figure V-28. A 950 K, l'heptanoate de méthyle réagit toujours par métathèse avec les radicaux H et

OH pour former des radicaux MHPXJ, notamment le radical MHP2J. Les voies de consommation de ces radicaux formés sont essentiellement des réactions d'isomérisation, qui redistribuent les différents isomères, et les réactions de décomposition qui débouchent sur la formation des espèces de petites tailles.

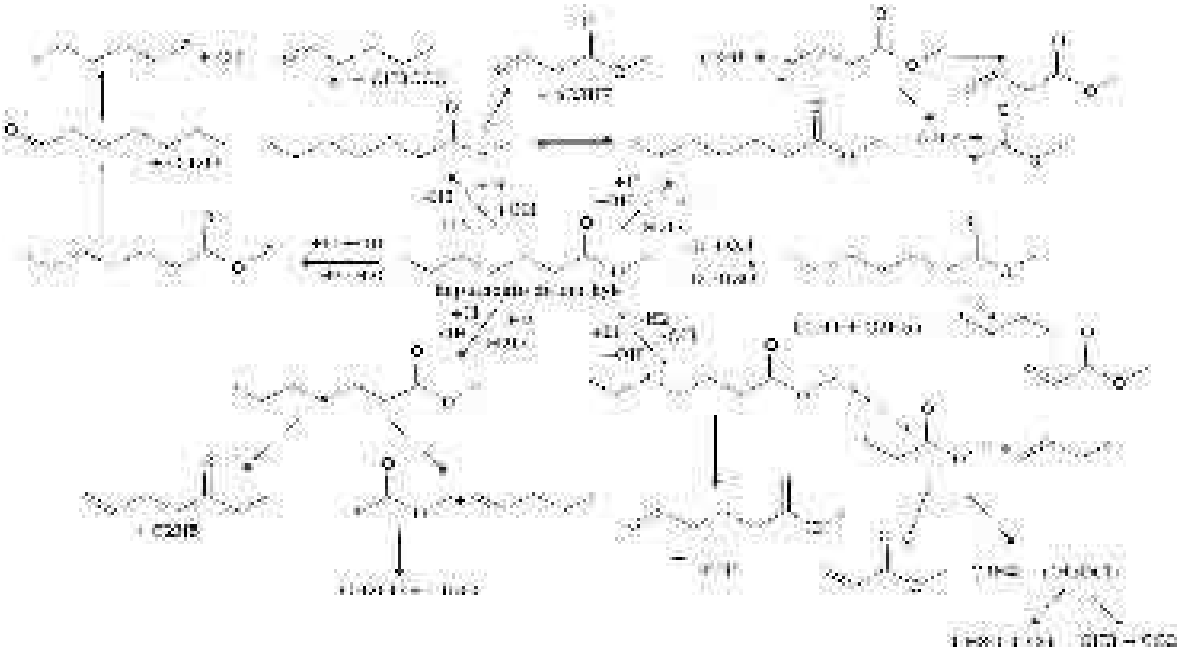


Figure V-28 : Voies de dégradations principales de l'heptanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange heptanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à la stoechiométrie et à haute pression. Ceci nous a permis de déterminer les réactions auxquelles le profil de l'heptanoate de méthyle est le plus sensible. Les résultats de cette analyse sont présentés sur les figures V-29 et V-30.

La figure V-29 présente les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles à une température de 620 K. Dans ces conditions, les réactions les plus sensibles sont les réactions de métathèse de l'heptanoate de méthyle avec le radical OH (MHP + OH ⇄ MHP7J + H_2O ; MHP + OH ⇄ MHP6J + H_2O ; MHP + OH ⇄MHP5J + H_2O ; MHP + OH ⇄ MHP4J + H_2O ; MHP + OH ⇄MHP3J + H_2O ; MHP + OH ⇄ MHP2J + H_2O ; MHP + OH ⇄ MHPMJ + H_2O) et CH_3O (MHP + CH_3O ⇄ MHP2J + H_2O). Ces réactions favorisent la consommation de l'heptanoate de méthyle, et spécialement celles générant les radicaux MHP7J, MHP3J et MHP2J. Par contre, la réaction MHP + O_2 ⇄ MHP2J + HO_2 présentant un coefficient de sensibilité positif ralentit la consommation de l'heptanoate de méthyle. La réaction CH_2O + OH ⇄ HCO + H_2O présente un coefficient de sensibilité positif traduisant la consommation des radicaux OH dans cette réaction. L'oxydation de l'heptanoate de méthyle est également sensible aux réactions d'isomérisation (MHP2OO ⇄ MHP2OOH4J, MHP3OO ⇄ MHP3OOH2J et MHP3OO ⇄ MHP3OOH5J).

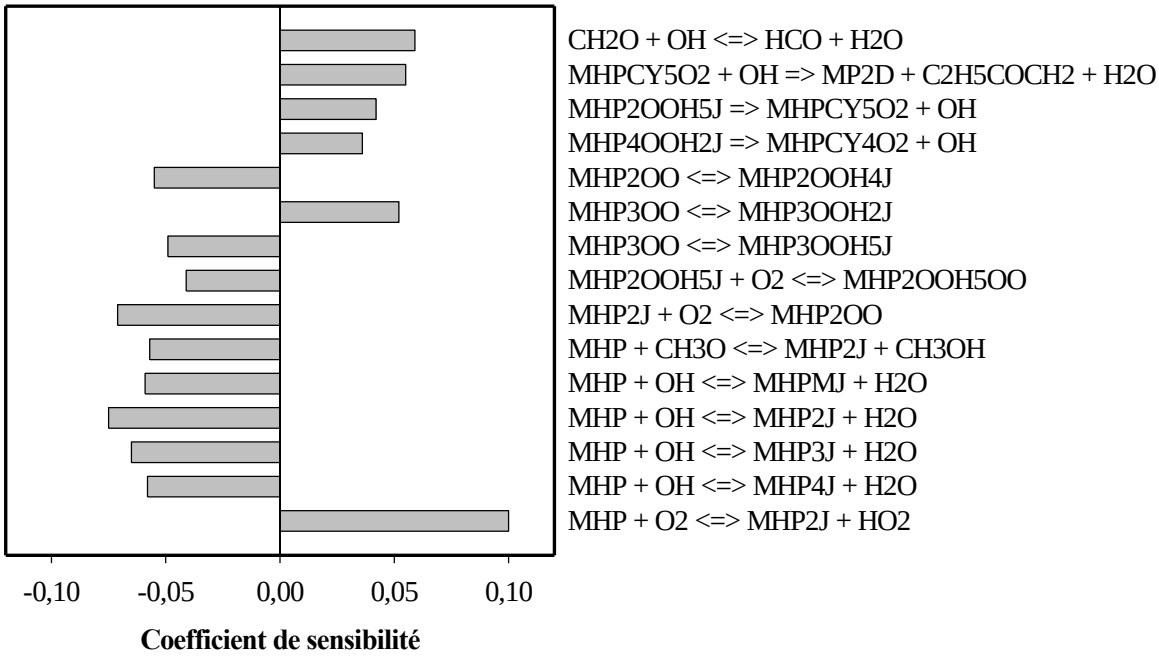


Figure V-29 : Coefficient de sensibilité pour l'heptanoate de méthyle lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur à T=620 K, à 10 atm et φ=1

La figure V-30 présente les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles à une température de 950 K et à une richesse de 1. A cette température, nous remarquons que les réactions impliquant directement l'heptanoate de méthyle ne constituent plus des réactions sensibles à l'exception de la seule réaction de métathèse de l'heptanoate de méthyle avec le radical OH : MHP + OH ⇄ MHP2J + H_2O. La réaction HO_2 + OH ⇄ H_2O + O_2 transforme deux radicaux, dont un très réactif, en deux espèces stables : elle inhibe la consommation de l'heptanoate de méthyle. Par contre, la réaction CH_3 + HO_2 ⇄ CH_3O + OH qui forme deux radicaux plus réactifs, accélère la consommation de l'hydrocarbure. La réaction H + O_2 ⇄ OH + O présentant un coefficient de sensibilité négatif produit le radical OH, ce qui favorise également l'oxydation de MHP. La réaction CH_2O + OH ⇄ HCO + H_2O présente un coefficient de sensibilité positif : elle consomme ainsi des radicaux OH. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction CH_2O + HO_2 ⇄ HCO + H_2O_2 qui présente un coefficient négatif de sensibilité. La molécule H_2O_2 produite, peut être dégradée de deux manières : soit par une réaction de métathèse redonnant un radical HO_2, soit par décomposition produisant 2 radicaux OH. Enfin, les réactions C_2H_3 + O_2 ⇄ CH_2O + HCO et C_2H_3 + O_2 ⇄ CH_2CHO + O sont des réactions qui entrent également en concurrence l'une avec l'autre.

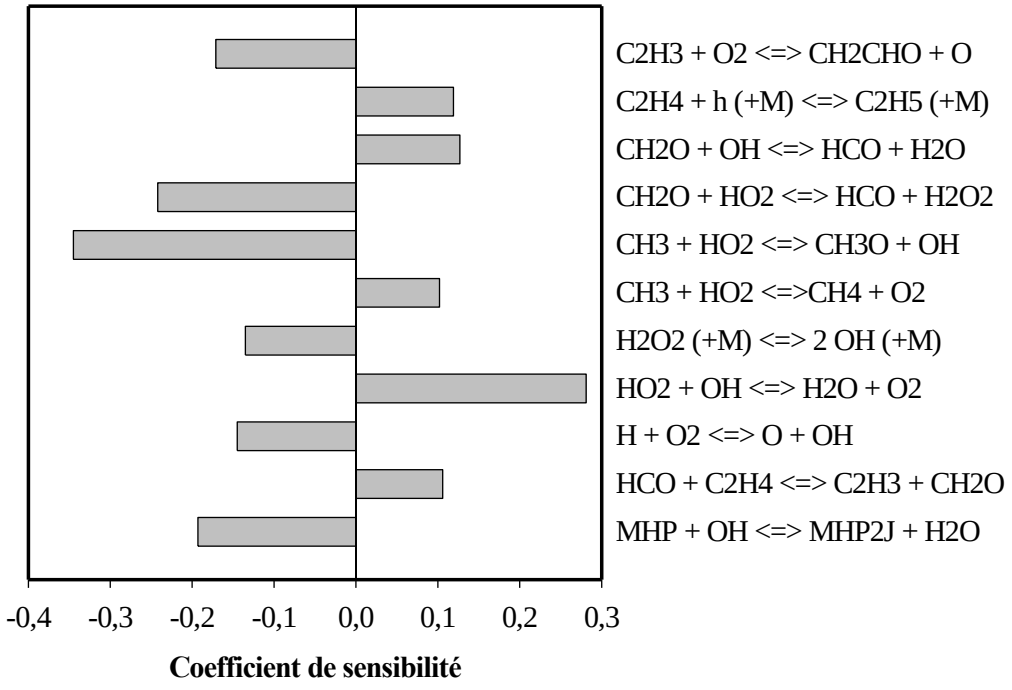


Figure V-30 : Coefficient de sensibilité pour l'heptanoate de méthyle lors de l'oxydation de l'heptanoate de méthyle en réacteur à T=950 K, à 10 atm et φ=1

1.6. Oxydation de l'octanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

Le tableau V-6 récapitule les conditions expérimentales de l'oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur auto-agité par jets gazeux.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MO} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$20{,}80.10^{-3}$	$9{,}782.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$12{,}50.10^{-3}$	$9{,}865.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}25.10^{-3}$	$9{,}928.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-6 : Oxydation de l'octanoate de méthyle (MO) en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Ces expériences nous ont permis d'obtenir l'évolution en fonction de la température des concentrations des réactifs, des produits et principaux intermédiaires stables présentés sur les figures V-31 à V-33.

Nous observons les trois zones d'oxydation des hydrocarbures à savoir la zone de flamme froide, la zone de coefficient négatif de température, et la zone de haute température.

Dans les conditions expérimentales, l'octanoate de méthyle réagit rapidement pour former d'une part des hydrocarbures intermédiaires, alcènes et méthane principalement, et d'autre part des composés oxygénés, CH_2O et CO essentiellement. Les fractions molaires des espèces suivantes ont été mesurées : l'octanoate de méthyle (MO), l'oxygène, le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, le méthanol, le méthane, l'éthane, l'éthylène, l'acétylène, l'acétaldéhyde, le propène, le but-1-ène, le buta-1,3-diène, le pent-1-ène, le hex-1-ène, le prop-2-énal, le propanal, le butanal et les esters méthyliques insaturés (prop-2-enoate de méthyle, but-3-enoate de méthyle, pent-4-enoate de méthyle, hex-5-enoate de méthyle, hept-6-enoate de méthyle).

c) Confrontation modèle-expérience

Les profils expérimentaux et simulés correspondant à l'évolution des fractions molaires des réactifs et des produits en fonction de la température sont présentés sur les figures V-31 à V-33.

Comme on peut le constater, le modèle représente convenablement les résultats expérimentaux pour les trois richesses.

En milieu pauvre, l'éthylène, le méthane et le formaldéhyde sont bien simulés par le modèle, quelle que soit la température. Par contre, le modèle sous-estime la formation de H_2O à basse température entre 500 et 750 K et l'acétaldéhyde sur tout le domaine de température. Le propène et l'acétylène sont eux surestimés à haute température (>800 K).

Pour un mélange stœchiométrique, la consommation de l'octanoate de méthyle et les maxima des intermédiaires réactionnels sont bien simulés, sauf pour l'éthane qui surestimé à haute température.

En milieu riche, le profil de l'éthylène est quant à lui sous-estimé au delà de 900 K. L'hydrogène et le propène sont formés un peu plus tôt par le modèle à haute température.

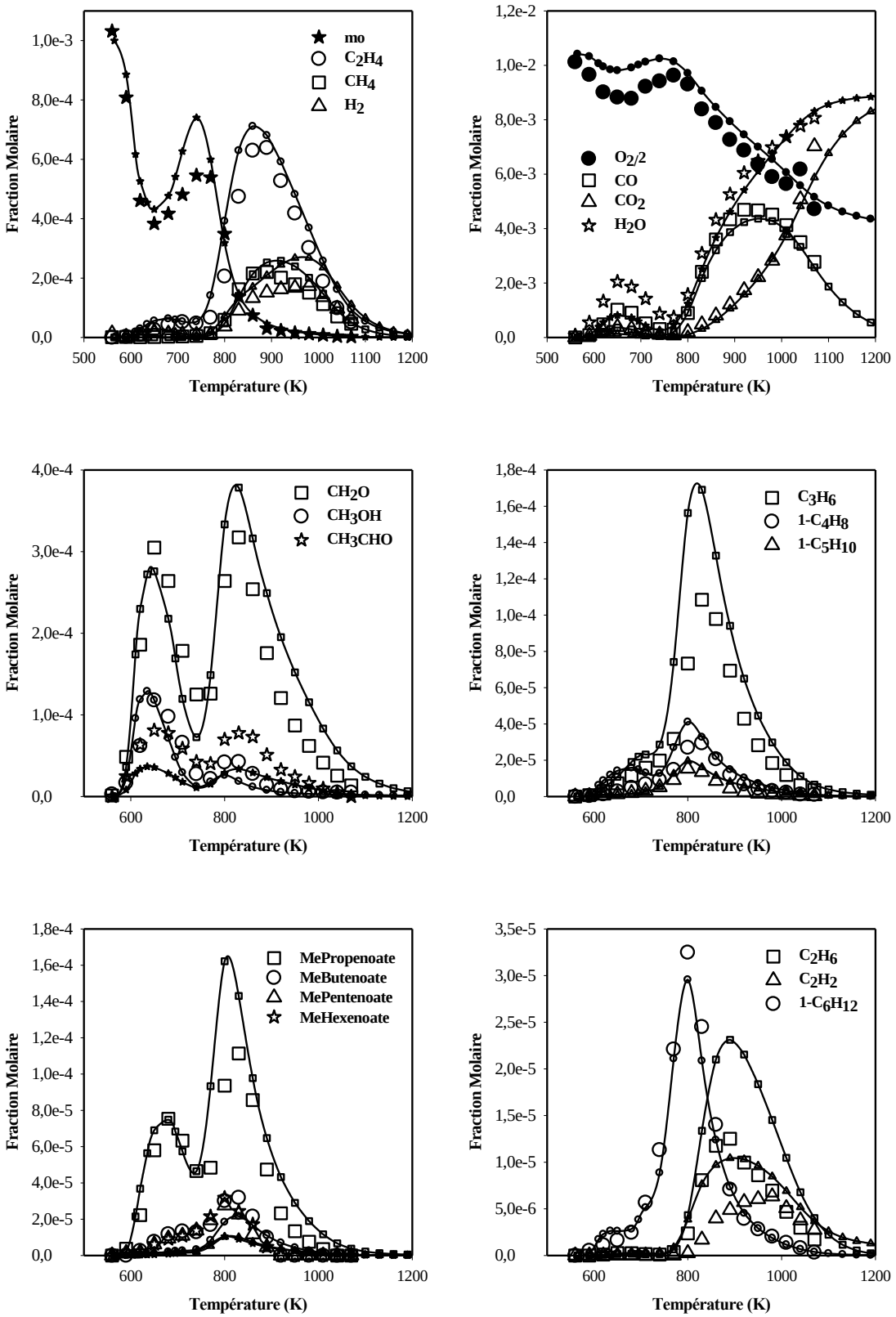


Figure V-31 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MO, 20800 ppm de O_2, φ=0,6, τ=0,7 s

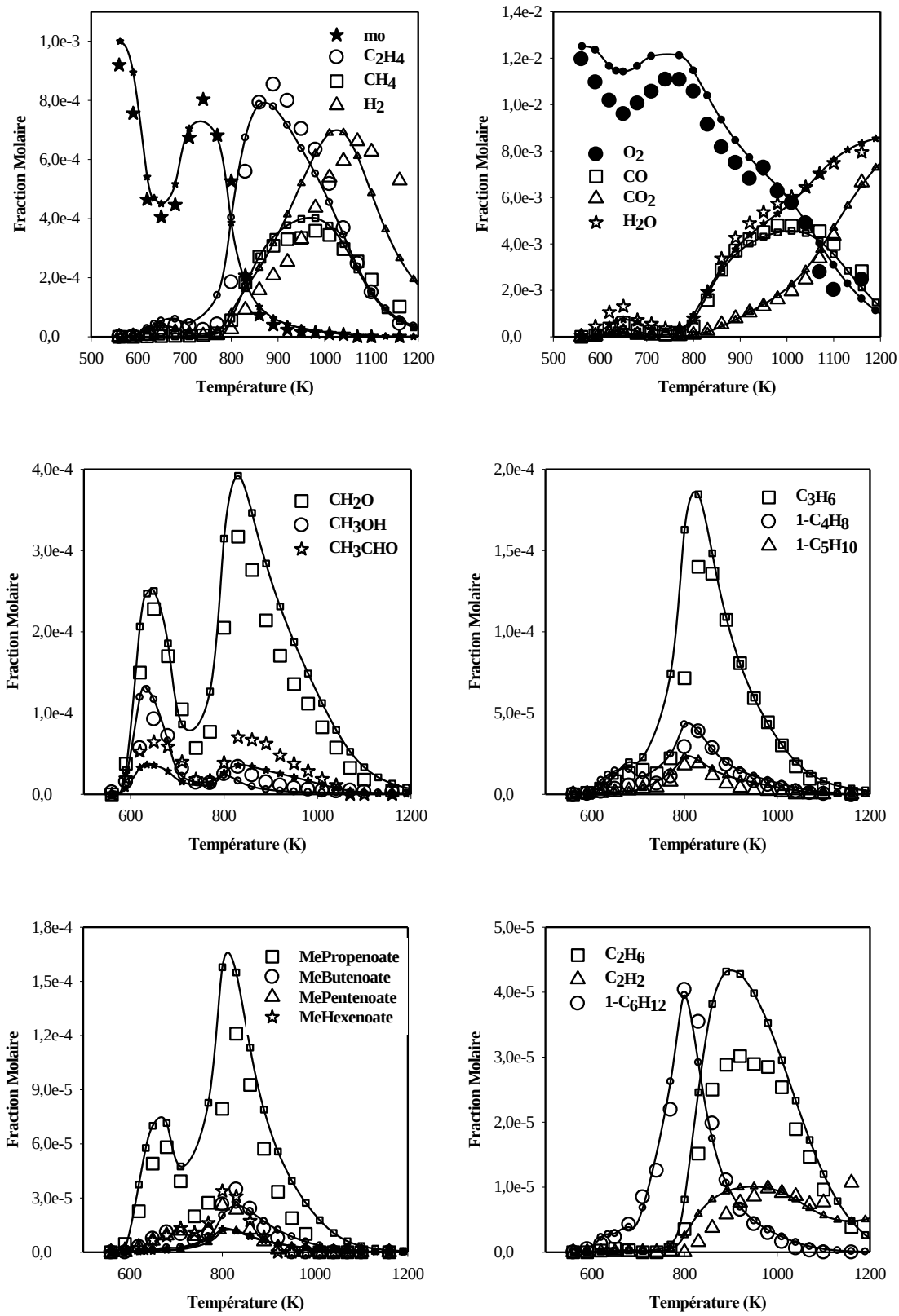


Figure V-32 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MO, 12500 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

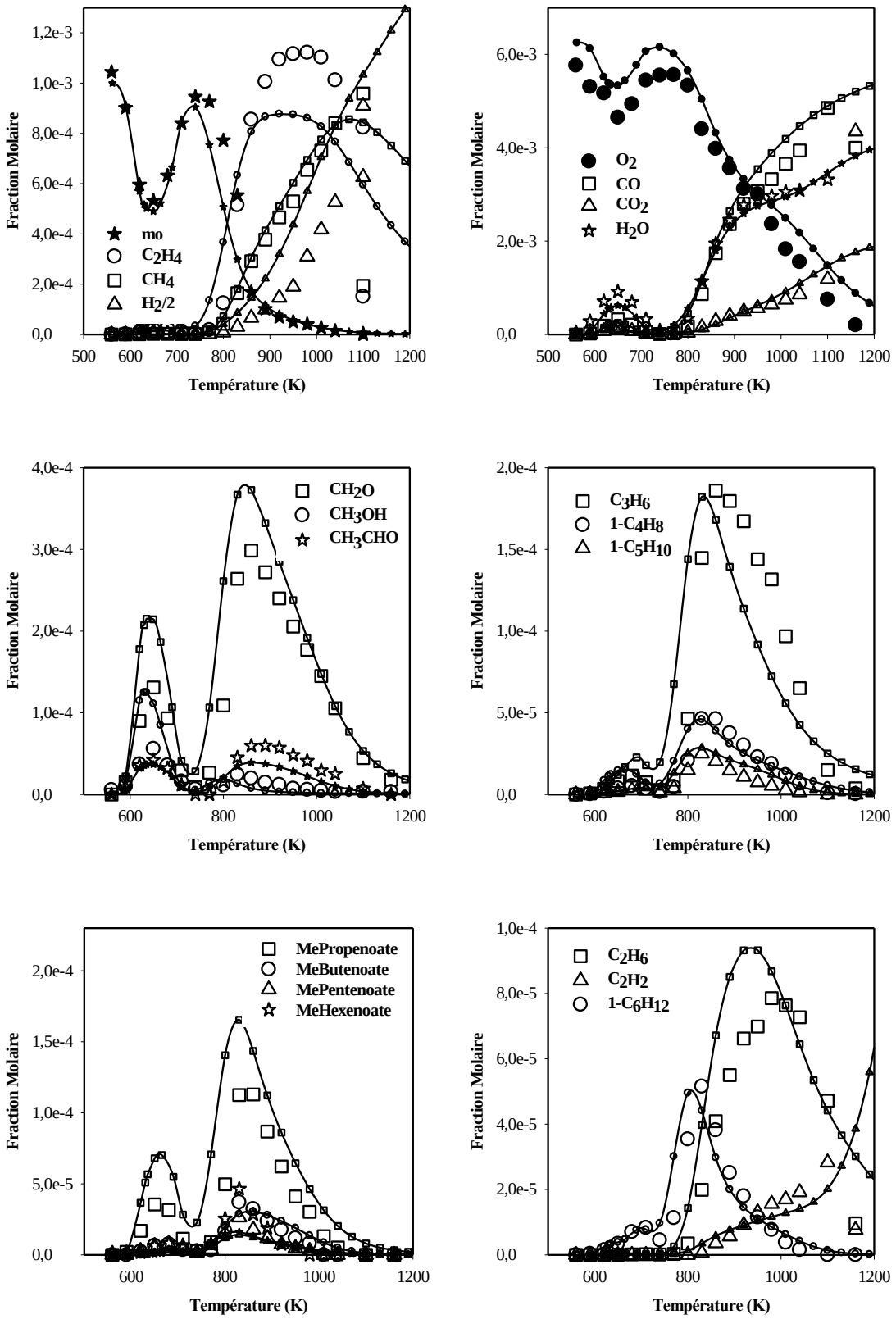


Figure V-33 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MO, 6250 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse afin de dégager les voies de dégradation importantes de l'octanoate de méthyle. Cette analyse a été faite à 10 atm et pour une richesse de 1.

- Les voies de décompositions de l'octanoate de méthyle très simplifiées à 650 K sont représentées sur la figure V-34. A cette température, l'octanoate de méthyle réagit à plus de 95% par des réactions de métathèse avec le radical OH et CH_3O pour former les différents radicaux MOXJ (X=m, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8). Ces radicaux vont ensuite s'additionner sur l'oxygène principalement (>90%) pour former des radicaux MOXOO. Les réactions d'isomérisation et d'oxydation représentent les autres voies réactionnelles de ces radicaux, en particulier celles d'isomérisation. Les radicaux MOXOO réagissent majoritairement par des réactions d'isomérisation pour former des radicaux MOXOOHZJ (Z= m, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8). Ces nouveaux radicaux vont ensuite s'additionner sur l'oxygène moléculaire pour former des radicaux MOXOOHZOO, ou bien réagir pour former des éthers cycliques MOCYXOZ.

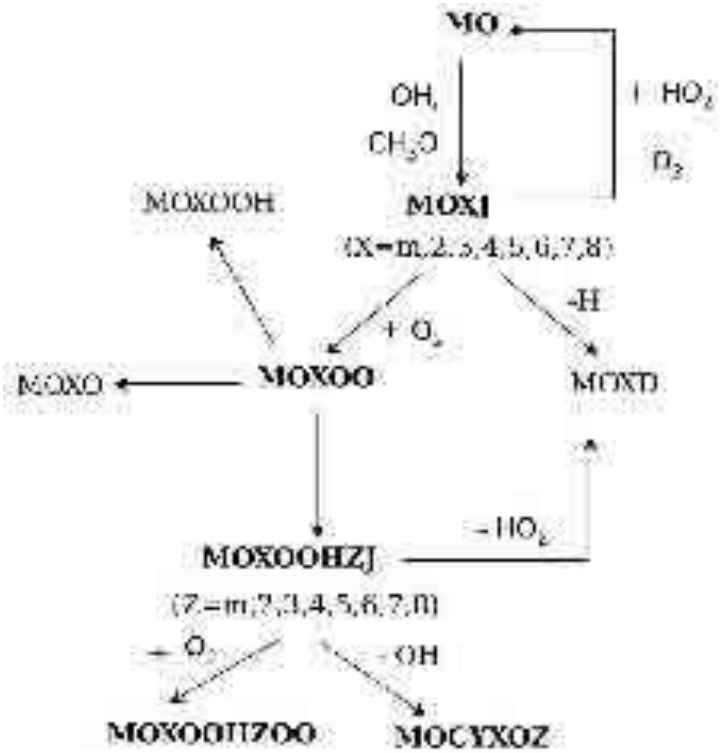


Figure V-34 : Voies de dégradations principales de l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange octanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=650 K

- Le schéma de dégradation de l'octanoate de méthyle à 950 K est présenté sur la figure V-35. A 950 K, l'octanoate de méthyle réagit toujours par métathèse avec les radicaux H et OH pour former des radicaux MOXJ, en particulier MO2J (24%). A cette température, le radical MO2J va ensuite se décomposer majoritairement (86%) par rupture de liaison C-C pour former C_5H_{11}-1 et le prop-2-énoate de méthyle. Le radical MO2J s'isomérise également pour former les radicaux MO5J (9,6%) et MOMJ (4%). Les autres radicaux formés MO8J, MO7J, MO6J, MO5J, MO4J et MO3J se décomposent également par rupture de liaison C-C pour former de nouveaux radicaux et des esters insaturés inférieurs ou bien des 1-oléfines et des radicaux primaires d'ester méthylique. Les réactions d'isomérisation représentent une autre possibilité réactionnelle de ces radicaux MOXJ et permettent une redistribution des différents isomères formés.

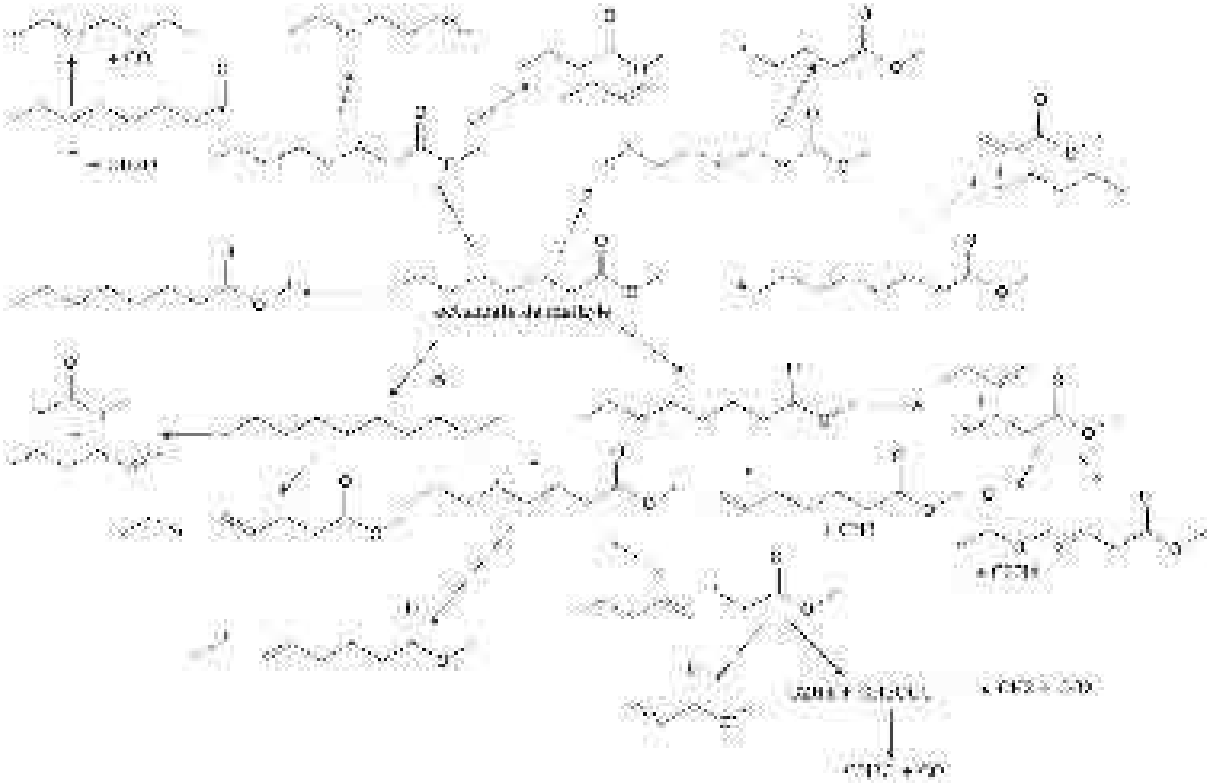


Figure V-35 : Voies de dégradations principales de l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange octanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à la stoechiométrie et à haute pression. Ceci nous a permis de déterminer les réactions auxquelles la consommation de l'octanoate de méthyle est le plus sensible. Les résultats de cette analyse sont présentés sur les figures V-36 et V-37.

La figure V-36 présente les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles à une température de 650 K et une richesse de 1. Dans ces conditions, les réactions les plus sensibles sont les réactions de métathèse de l'octanoate de méthyle avec le radical OH (MO + OH ⇄ MO7J + H_2O ; MO + OH ⇄ MO6J + H_2O ; MO + OH ⇄ MO5J + H_2O ; MO + OH ⇄ MO4J + H_2O ; MO + OH ⇄ MO3J + H_2O ; MO + OH ⇄ MO2J + H_2O ; MO + OH ⇄ MOMJ + H_2O) et CH_3O (MO + CH_3O ⇄ MO2J + H_2O). Ces réactions favorisent la consommation de l'octanoate de méthyle, et spécialement celles générant les radicaux MO7J, MO3J et MO2J. La réaction CH_2O + OH ⇄ HCO + H_2O consommant les radicaux OH présente un coefficient de sensibilité positif. Le profil de l'octanoate de méthyle est également sensible aux réactions d'isomérisation MO6OO ⇄ MO6OOH2J et MO6OO ⇄ MO6OOH4J. Ces deux réactions d'isomérisation présentent des coefficients de sensibilité de signes opposés.

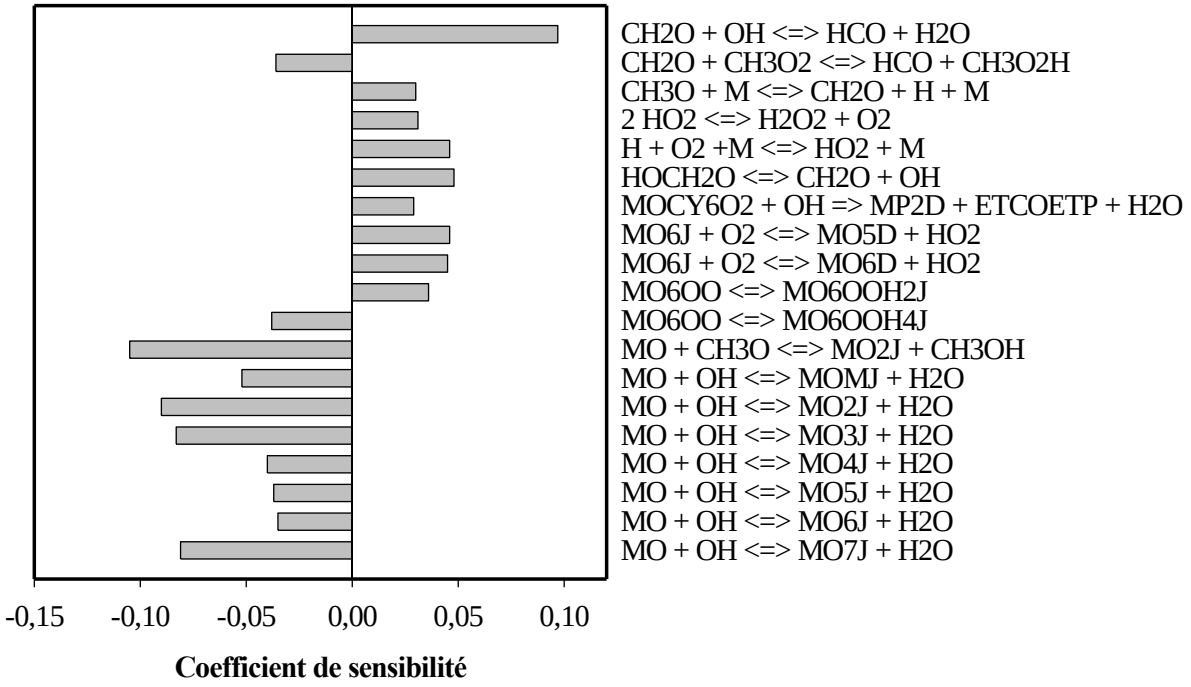


Figure V-36 : Coefficient de sensibilité pour l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur à T=650 K, à 10 atm et φ=1,0

La figure V-37 présente les coefficients de sensibilité des réactions les plus sensibles à une température de 950 K et à une richesse de 1. A cette température, nous remarquons que les réactions impliquant directement l'octanoate de méthyle ne constituent plus des réactions sensibles à l'exception de la seule réaction de métathèse de l'octanoate de méthyle avec le radical OH : MO + OH ⇄ MO2J + H_2O. La réaction HO_2 + OH ⇄ H_2O + O_2, transforme deux radicaux en deux espèces stables : elle inhibe la consommation de l'octanoate de méthyle. Par contre, la réaction CH_3 + HO_2 ⇄ CH_3O + OH qui est une réaction de propagation formant deux radicaux réactifs, accélère la consommation de l'hydrocarbure. La réaction H + O_2 ⇄ OH + O_2 présentant un coefficient de sensibilité négatif produit le radical OH, ce qui favorise également la réactivité. La réaction CH_2O + OH ⇄ HCO + H_2O qui consomme ainsi des radicaux OH présente un coefficient de sensibilité positif. Cette réaction entre en concurrence avec la réaction CH_2O + HO_2 ⇄ HCO + H_2O_2 qui présente un coefficient négatif de sensibilité. Enfin, les réactions C_2H_3 + O_2 ⇄ CH_2O + HCO et C_2H_3 + O_2 ⇄ CH_2CHO + O sont des réactions qui entrent également en concurrence l'une contre l'autre.

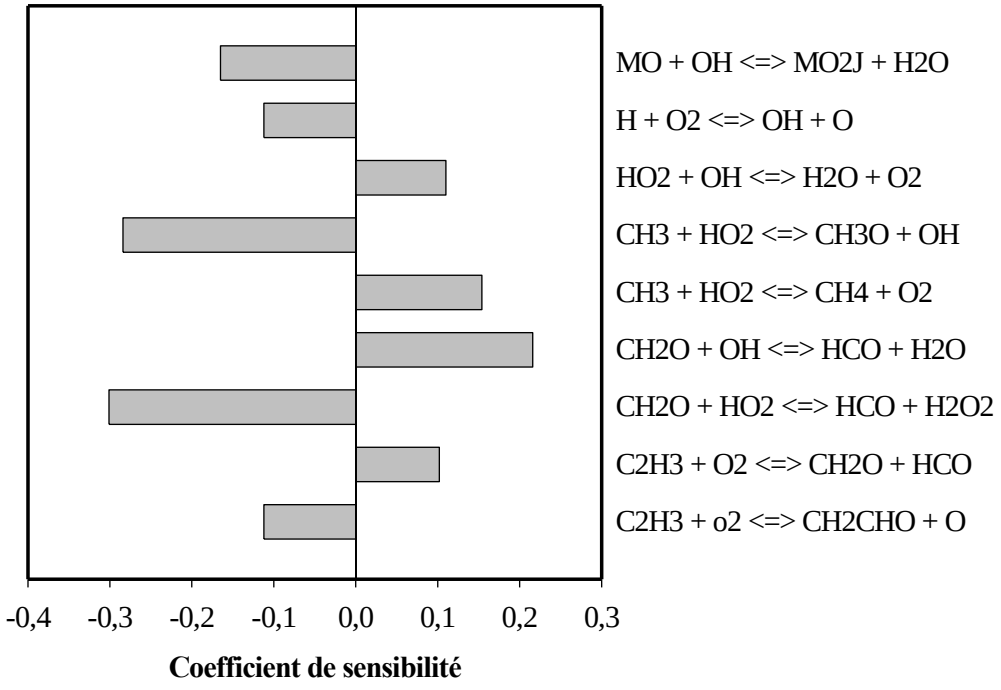


Figure V-37 : Coefficient de sensibilité pour l'octanoate de méthyle lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle en réacteur auto-agité à T=950 K, à 10 atm et φ=1,0

1.7. Oxydation du nonanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

Le tableau V-10 résume les conditions opératoires de l'étude du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MN} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$23{,}33.10^{-3}$	$9{,}757.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$14{,}00.10^{-3}$	$9{,}850.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$7{,}00.10^{-3}$	$9{,}920.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-7 : Oxydation du nonanoate de méthyle (MN) en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les analyses spectrales et chromatographiques ont montré que les produits formés lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité, dans nos conditions expérimentales sont : le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'éthylène, le méthane, le propène, l'acétylène, le buta-1,3-diène, les aldéhydes (formaldéhyde, acétaldéhyde, propanal, prop-2-énal, butanal), les 1-alcènes (but-1-ène, pent-1-ène, hex-1-ène, hept-1-ène) et les esters insaturés (prop-2-énoate de méthyle, but-3-énoate de méthyle, pent-4-énoate de méthyle, hex-5-énoate de méthyle, hept-6-énoate de méthyle).

c) Confrontation modèle-expérience

Les figures V-38 à V-40 présentent les comparaisons simulations (lignes et petits symboles)-expériences (grands symboles) pour les trois richesses étudiées (0,6 ; 1 et 2) des espèces formées par oxydation du nonanoate de méthyle. D'une manière générale, le modèle reproduit convenablement les observations expérimentales.

En milieu pauvre (φ=0,6), le modèle reproduit assez bien le profil du nonanoate de méthyle. Les quantités de CO, CO_2, H_2O, O_2, CH_4 et H_2 sont également bien reproduites. Les profils de l'éthylène et du propène sont bien reproduits à basse et moyenne température mais surestimés au delà de 900 K. Le modèle surestime également les concentrations du 1-butène (presque d'un facteur 2), du 1-pentène et du 1-hexène et les esters méthyliques inférieurs à l'exception du prop-2-enoate de méthyle. Le modèle reproduit assez bien les quantités de formaldéhyde sur l'ensemble du

domaine de température mais sous-estime les quantités d'acétaldéhyde.

A la stœchiométrie, le modèle est plus réactif à basse température entre 600 et 700 K, mais reproduit correctement au-delà de 700 K le profil du nonanoate de méthyle. Les profils de CO, CO_2, O_2, H_2O, H_2 et CH_4 sont toujours bien reproduits par le modèle. La tendance expérimentale du profil de l'éthylène est bien reproduite mais la quantité maximale est légèrement surestimée.

En milieu riche, le modèle reste beaucoup plus réactif toujours à basse température mais reproduit bien le profil du nonanoate de méthyle à haute température.

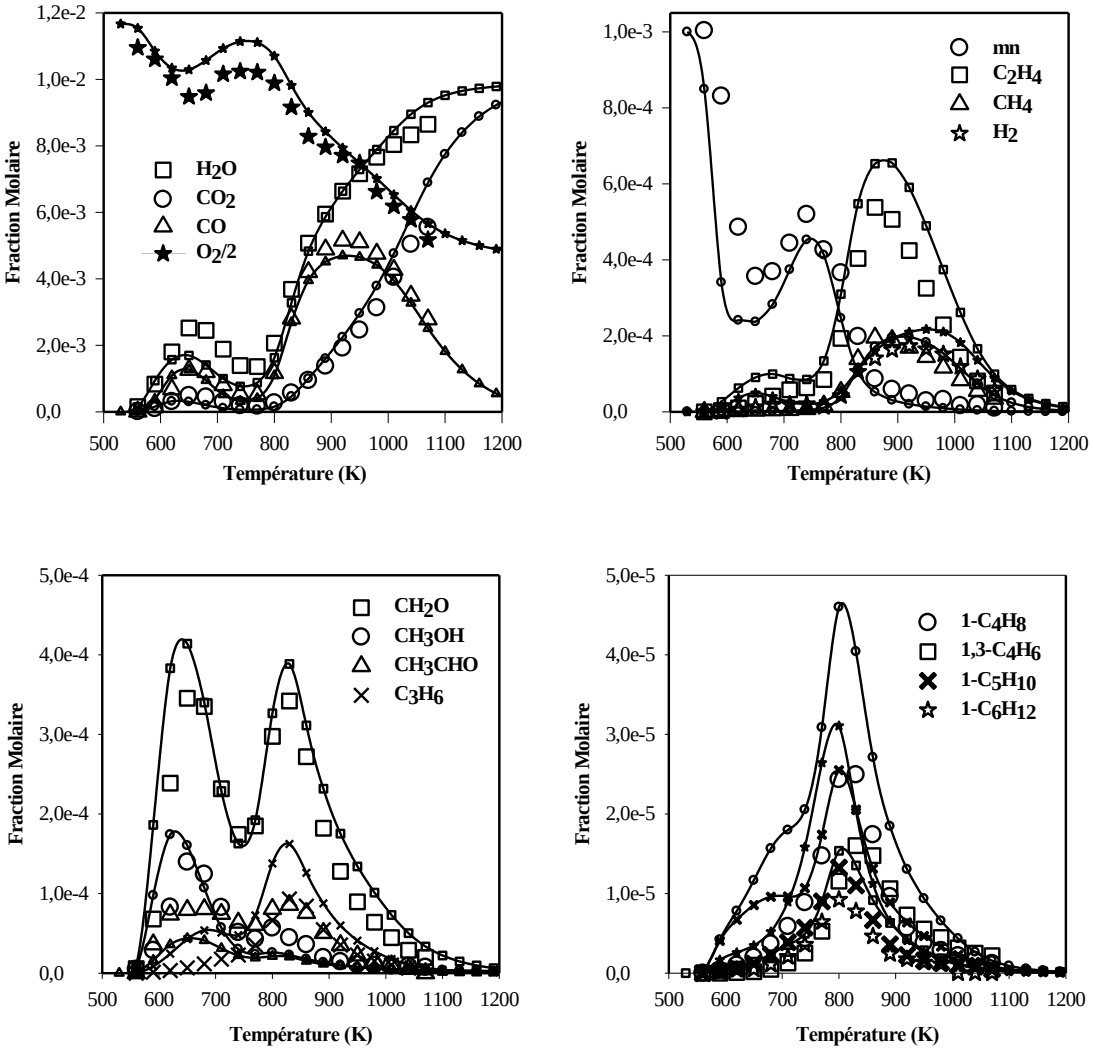


Figure V-38 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 23330 ppm de O_2, φ=0,6, τ=0,7 s

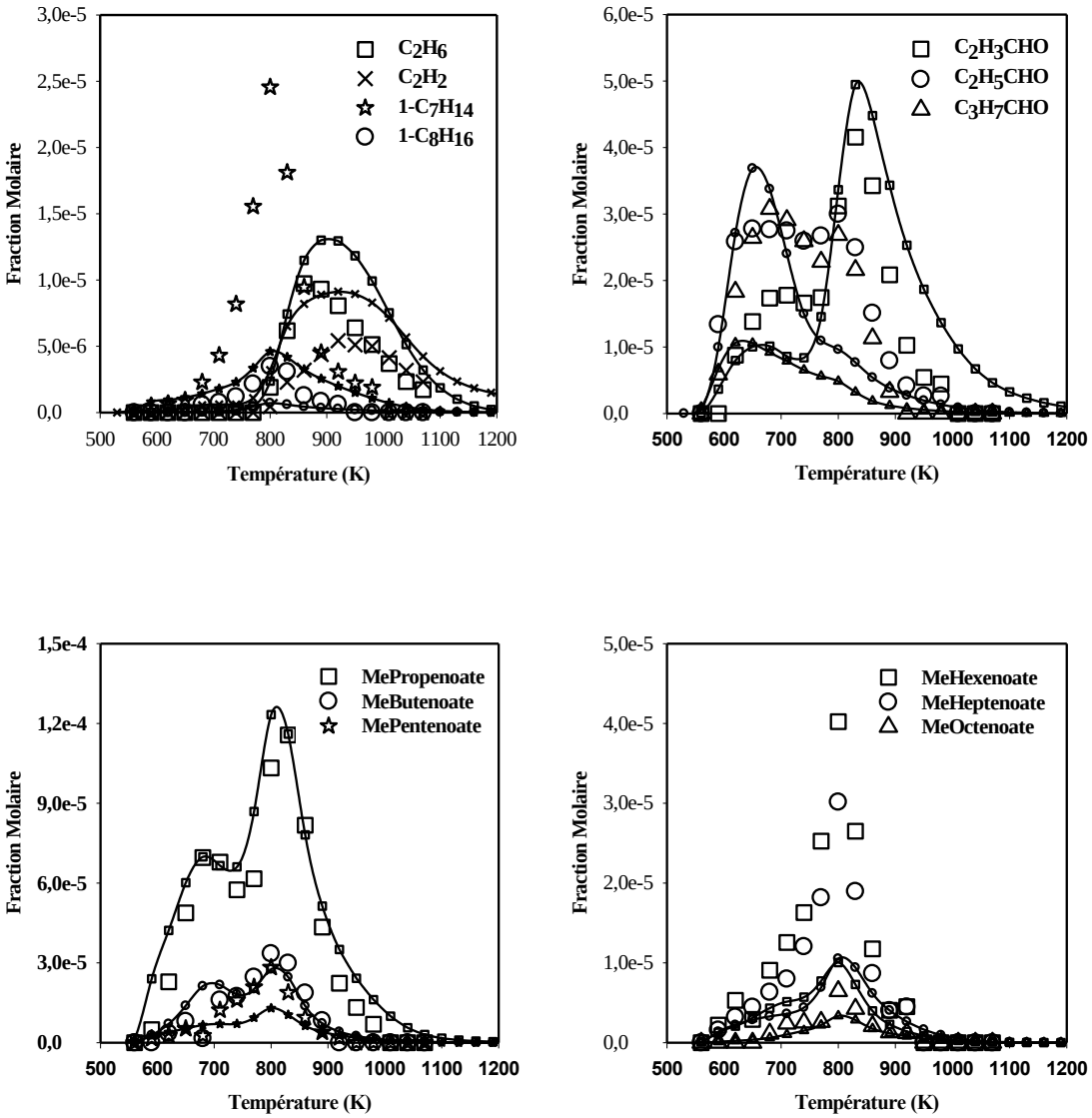


Figure V-38 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 23330 ppm de O_2, φ=0,6, τ=0,7 s

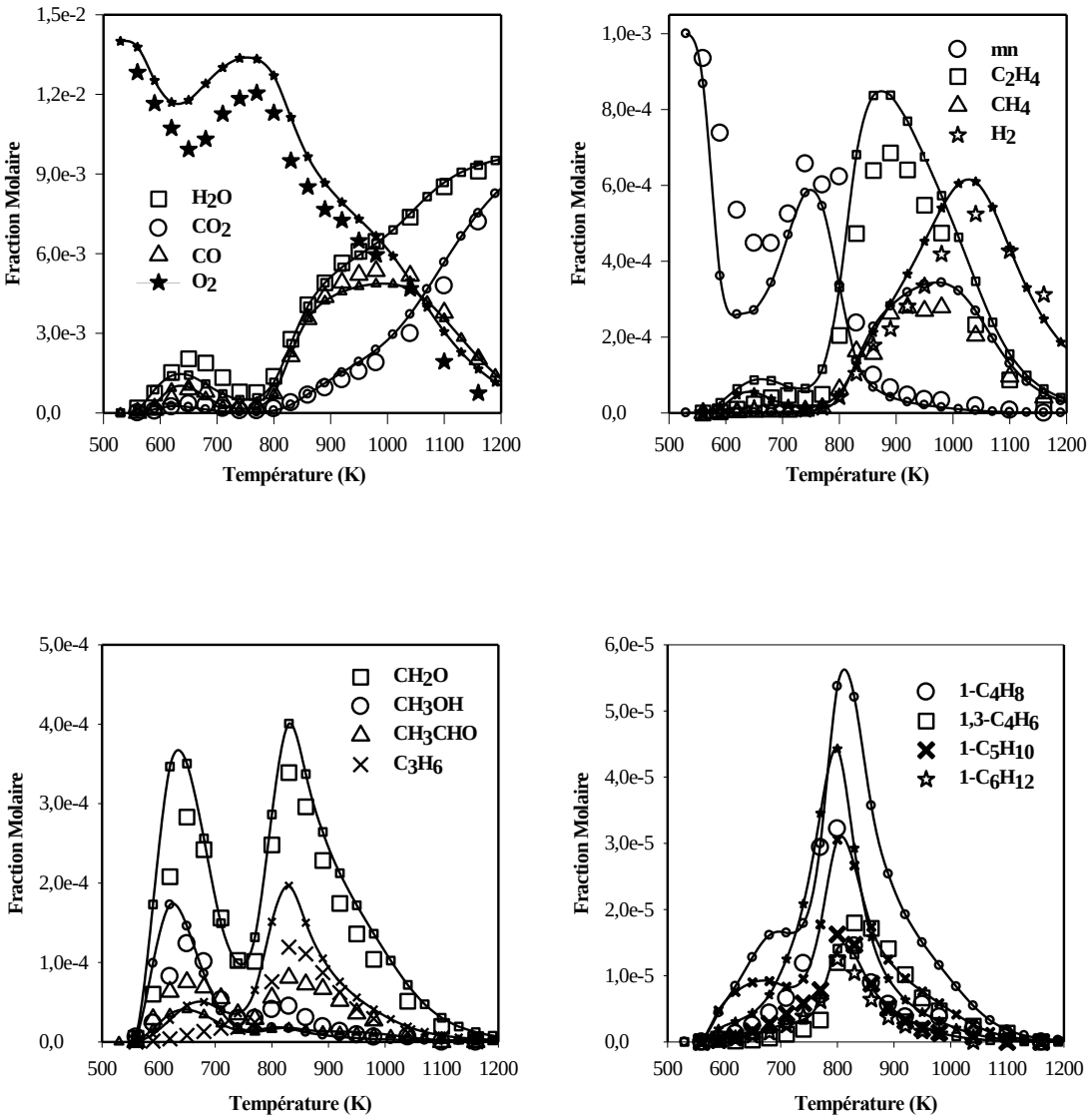


Figure V-39 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 14000 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

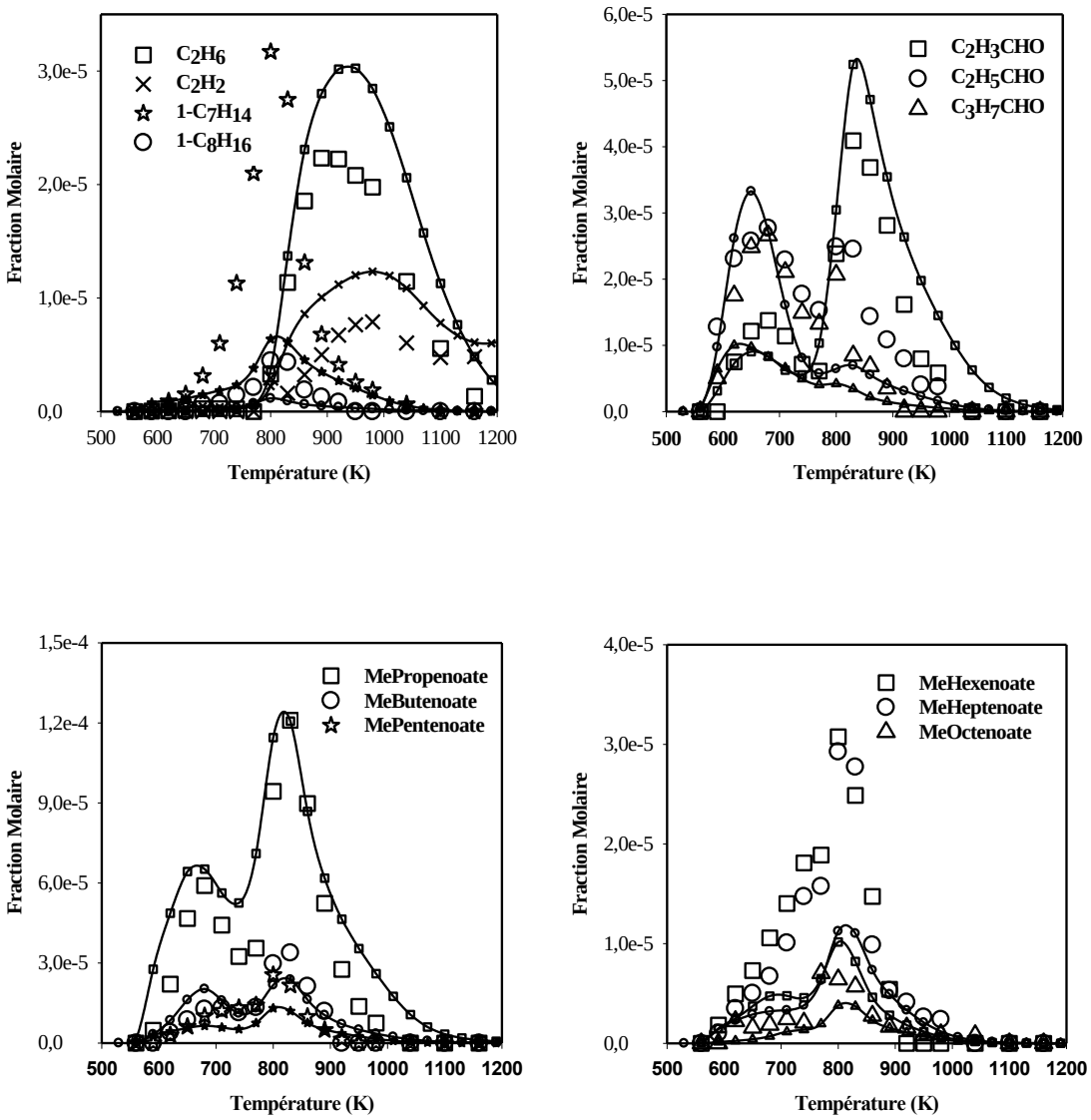


Figure V-39 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 14000 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

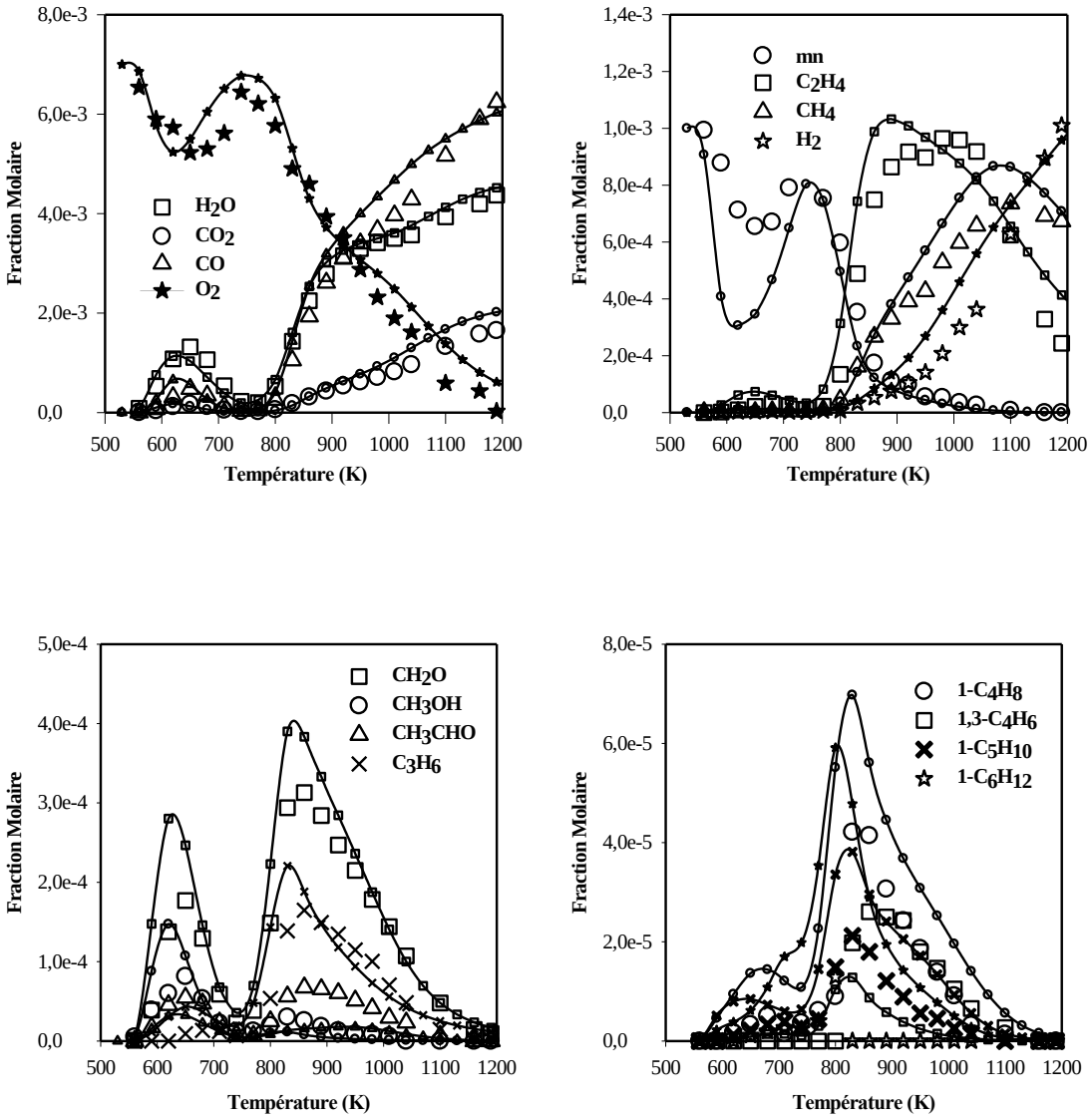


Figure V-38 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 23330 ppm de O_2, φ=0,6, τ=0,7 s

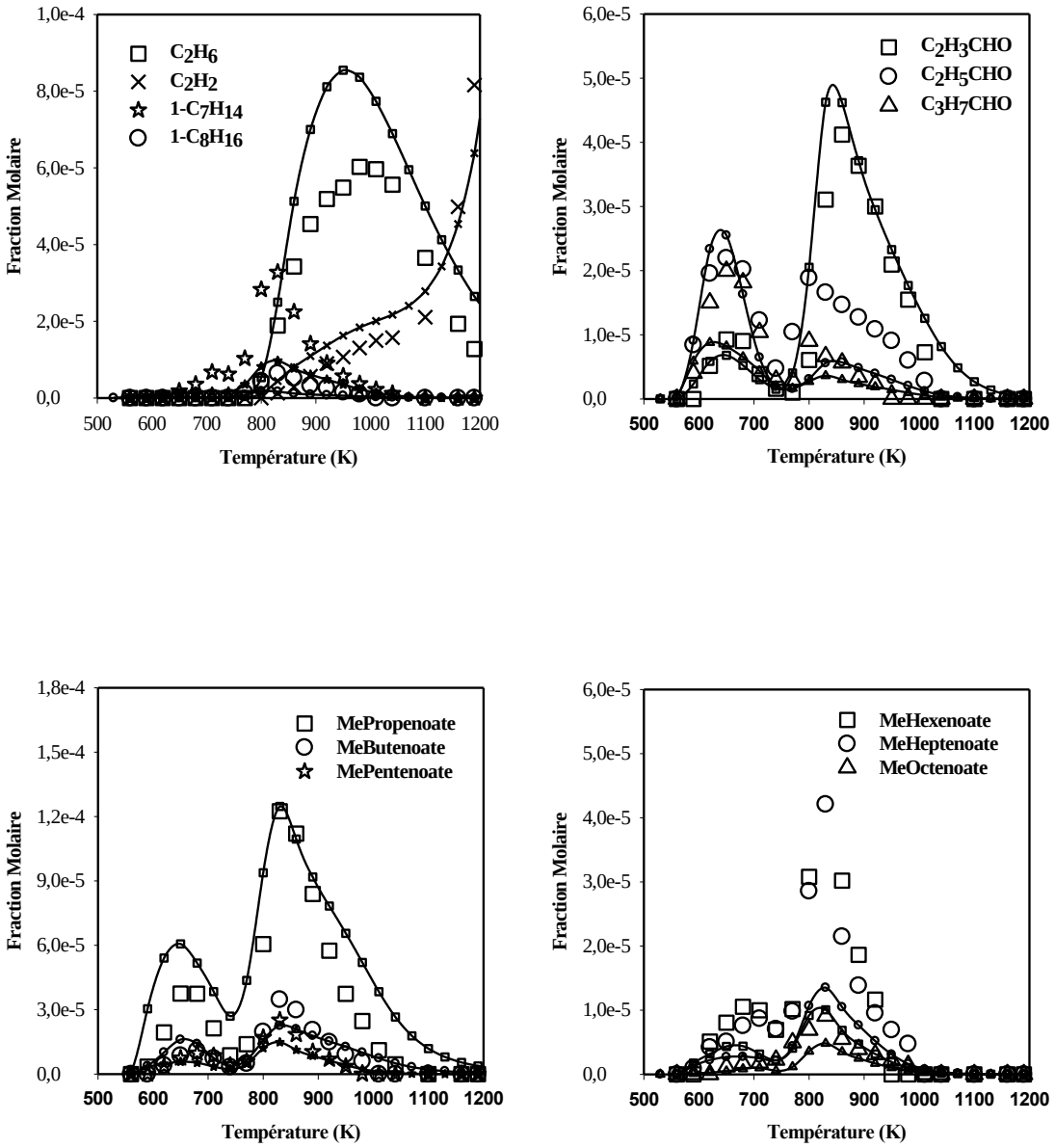


Figure V-40 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MN, 7000 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

- Analyse de voies réactionnelles

Les figures V-41 et V-42 présentent des schémas illustrant les voies majoritaires de consommation du nonanoate de méthyle déduites des analyses de vitesse effectuées respectivement à 650 et 950 K.

A 650 K le nonanoate de méthyle et les espèces dérivées réagissent selon le schéma réactionnel simplifié représenté sur la figure V-41. A cette température, la principale voie de réaction pour le nonanoate de méthyle passe par la formation des différents radicaux via des réactions de métathèses avec le radical OH. Ces radicaux vont alors majoritairement (80%) fixer l'oxygène pour former des radicaux peroxy-alkyles RO_2. Les réactions d'isomérisation et d'oxydation représentent les autres

possibilités réactionnelles de ces radicaux, mais sont des voies minoritaires.

Les radicaux peroxyalkyles RO_2 réagissent ensuite majoritairement par des réactions d'isomérisation pour former des radicaux hydroperoxyalkyles QO_2H. Ces nouveaux radicaux se décomposent pour former essentiellement des éthers cycliques et des radicaux OH.

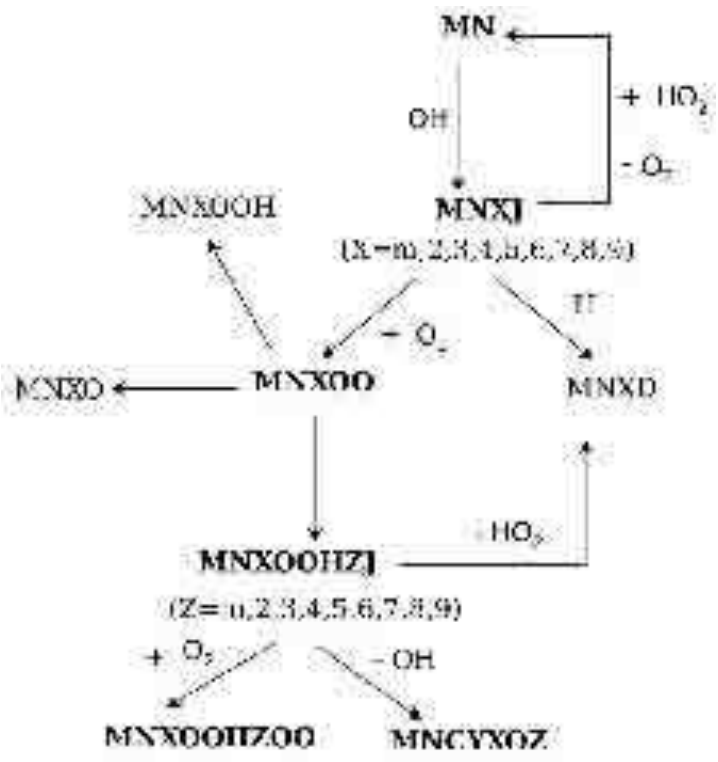


Figure V-41 : Voies de dégradations principales du nonanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange nonanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=650 K

Sur la figure V-42, est présenté le schéma de dégradation du nonanoate de méthyle à 950 K. Dans ces conditions, le nonanoate de méthyle réagit toujours par métathèse avec les radicaux OH et CH_3O pour former les radicaux, en particulier le radical MN2J.

Ces radicaux réagissent ensuite soit par des réactions d'isomérisation permettant la redistribution des isomères, soit par des réactions de rupture de liaison C-C pour former des alcènes ou esters insaturés et d'autres radicaux.

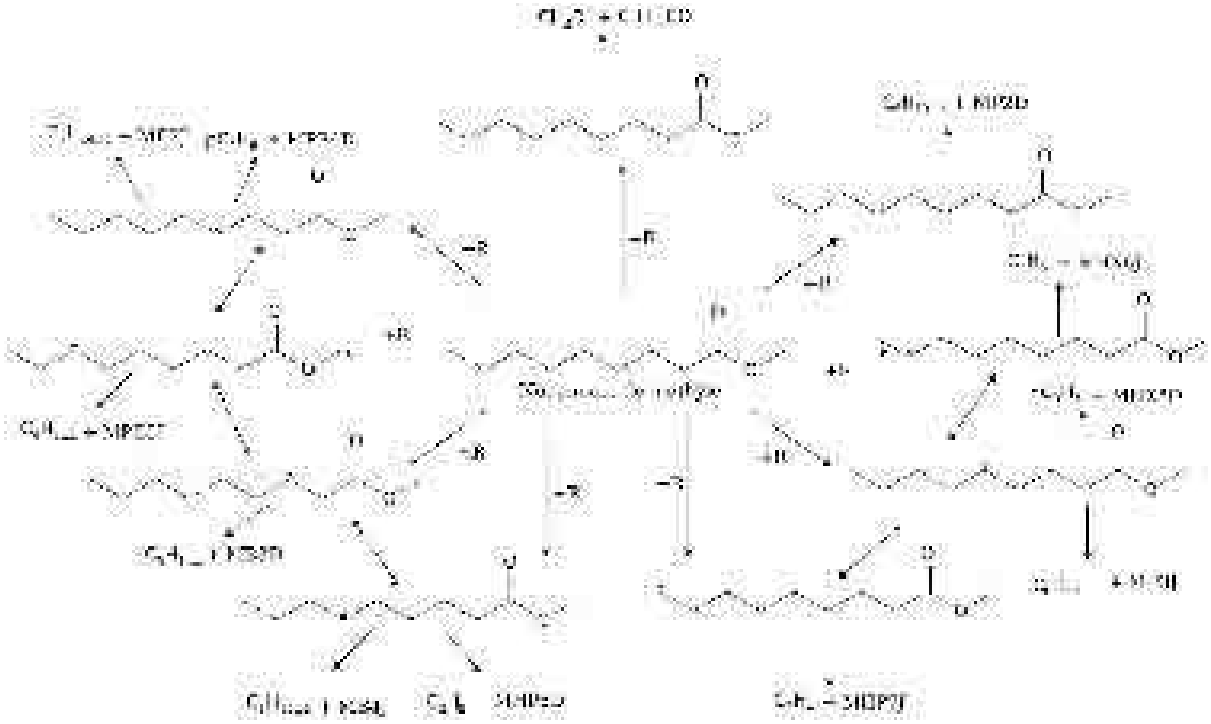


Figure V-42 : Voies de dégradations principales du nonanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange nonanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

- Analyse de sensibilité

Grâce au modèle proposé, nous avons réalisé une analyse de sensibilité à la stœchiométrie et haute pression. Nous avons ainsi déterminé les réactions auxquelles le profil du nonanoate de méthyle est le plus sensible. Les résultats de cette analyse sont présentés sur les figures V-43 et V-44. Un coefficient positif ou négatif est attribué à chaque réaction selon son impact, traduisant respectivement un effet promoteur ou inhibiteur de la réaction sur la consommation du nonanoate de méthyle.

Les réactions les plus influentes à T=650 K et à φ=1 (cf. figure V-43) sont les réactions de métathèse du nonanoate de méthyle avec le radical OH et plus particulièrement celles arrachant un atome d'hydrogène sur l'atome de carbone '2', formant le radical MN2J. La réaction CH_2O + OH ⇄ HCO + H_2O, présentant un coefficient de sensibilité positif, puisqu'elle consomme les radicaux OH. Cette réaction a donc un effet inhibiteur sur la consommation de l'ester.

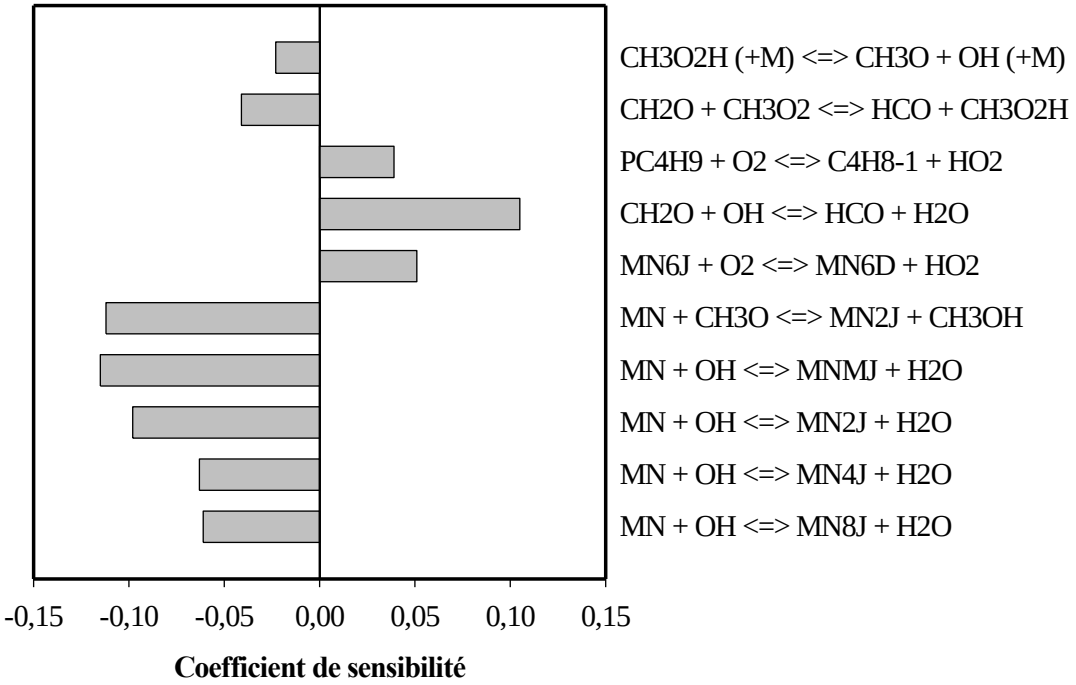


Figure V-43 : Coefficient de sensibilité pour le nonanoate de méthyle lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à T=650 K, à 10 atm et φ=1

Sur la figure V-44, sont présentées les réactions les plus influentes pour l'oxydation du nonanoate de méthyle à T=920 K. A cette température, les réactions les plus influentes sont toujours les réactions de métathèse du nonanoate de méthyle avec les radicaux OH (majoritairement) et H, particulièrement celles arrachant un atome d'hydrogène situé sur le carbone '2'. Outre les réactions de métathèse avec les radicaux OH et H, la consommation du nonanoate de méthyle est également sensible aux réactions de la base C_0-C_2. En effet, les réactions $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_3O + OH$ et $CH_2O + HO_2 \rightleftarrows HCO + H_2O_2$ ont un effet promoteur fortement marqué. Parallèlement, la réaction $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$, en consommant des radicaux OH, ralentit la consommation du nonanoate de méthyle.

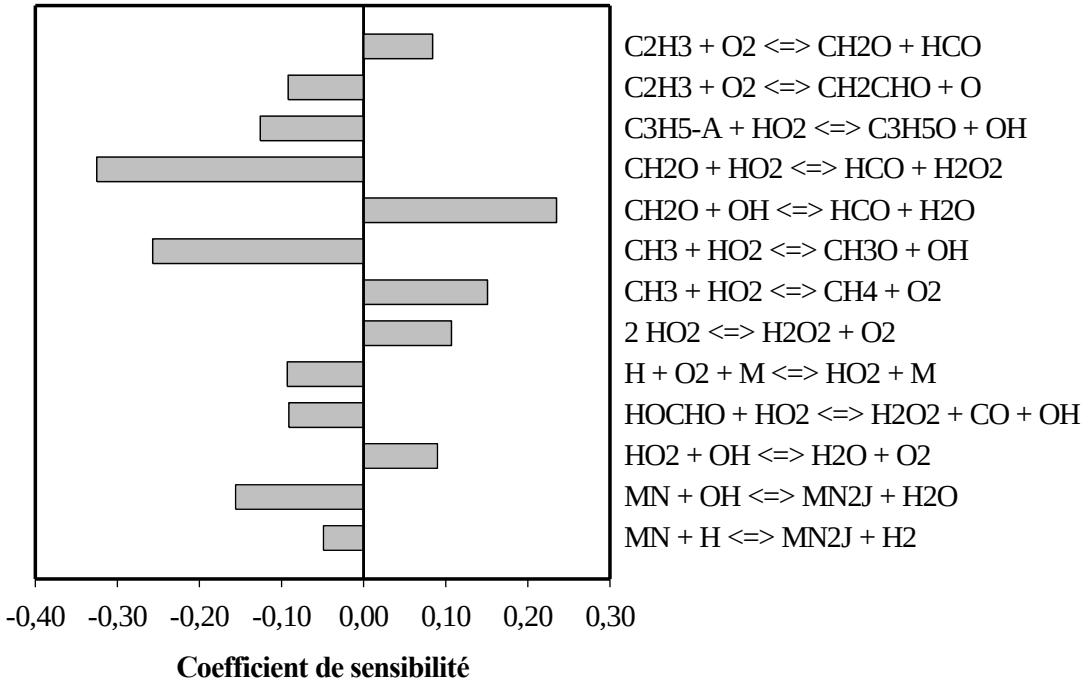


Figure V-44 : Coefficient de sensibilité pour le nonanoate de méthyle lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle en réacteur auto-agité à T=920 K, à 10 atm et φ=1

1.8. Oxydation du décanoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

Dans le tableau V-11, sont regroupées les conditions opératoires de l'étude du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MD} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$31{,}00.10^{-3}$	$9{,}680.10^{-1}$	0,5	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$15{,}50.10^{-3}$	$9{,}835.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$7{,}75.10^{-3}$	$9{,}913.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-8 : Oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Sur les figures V-45 à V-47, sont représentés les résultats expérimentaux (grands symboles), obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux. On peut observer que les produits formés majoritairement sont : le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde, le méthanol, le méthane, l'éthylène, le propène et l'hydrogène. D'autres espèces ont également été détectées mais en faibles quantités. Parmi ces espèces, on peut citer les 1-oléfines (1-C_4H_8, 1-C_5H_{10}, 1-C_6H_{12}, 1-C_7H_{14}, etc.), les aldéhydes (prop-2-énal, propanal, butanal, etc.), les esters insaturés (prop-2-enoate de méthyle, qui est le plus abondant, but-3-enoate de méthyle, pent-4-enoate de méthyle, hex-5-enoate de méthyle, etc.).

c) Confrontation modèle-expérience

Les figures V-45 à V-47 présentent les comparaisons simulations (lignes et petits symboles)-expériences (grands symboles) pour les trois richesses étudiées (0,6, 1 et 2) des espèces formées lors de l'oxydation du décanoate de méthyle. D'une manière générale, le modèle reproduit bien les tendances expérimentales.

En milieu pauvre (φ=0,6), le modèle reproduit assez bien le profil du carburant. Les quantités de CO, CO_2, H_2O, O_2, CH_4 et H_2 sont également bien reproduites. Les profils de l'éthylène et du propène sont bien reproduits à basse et moyenne température mais surestimés au-delà de 900 K. Le modèle surestime également les concentrations du but-1-ène (presque d'un facteur 2), du pent-1-ène et du hex-1-ène et les esters méthyliques inférieurs à l'exception du prop-2-enoate de méthyle. Le modèle reproduit assez bien les quantités de formaldéhyde sur l'ensemble du domaine de température mais sous-estime les quantités d'acétaldéhyde.

A la stœchiométrie, le modèle est plus réactif à basse température entre 600 et 700 K, mais reproduit correctement au-delà de 700 K le profil du décanoate de méthyle. Les profils de CO, CO_2, O_2, H_2O, H_2 et CH_4 sont toujours bien reproduits par le modèle. L'allure du profil de concentration de l'éthylène est bien reproduite mais la quantité maximale est légèrement surestimée.

En milieu riche, le modèle prévoit toujours une consommation du décanoate de méthyle trop importante à basse température tandis qu'on observe un bon accord modèle-expériences à haute température.

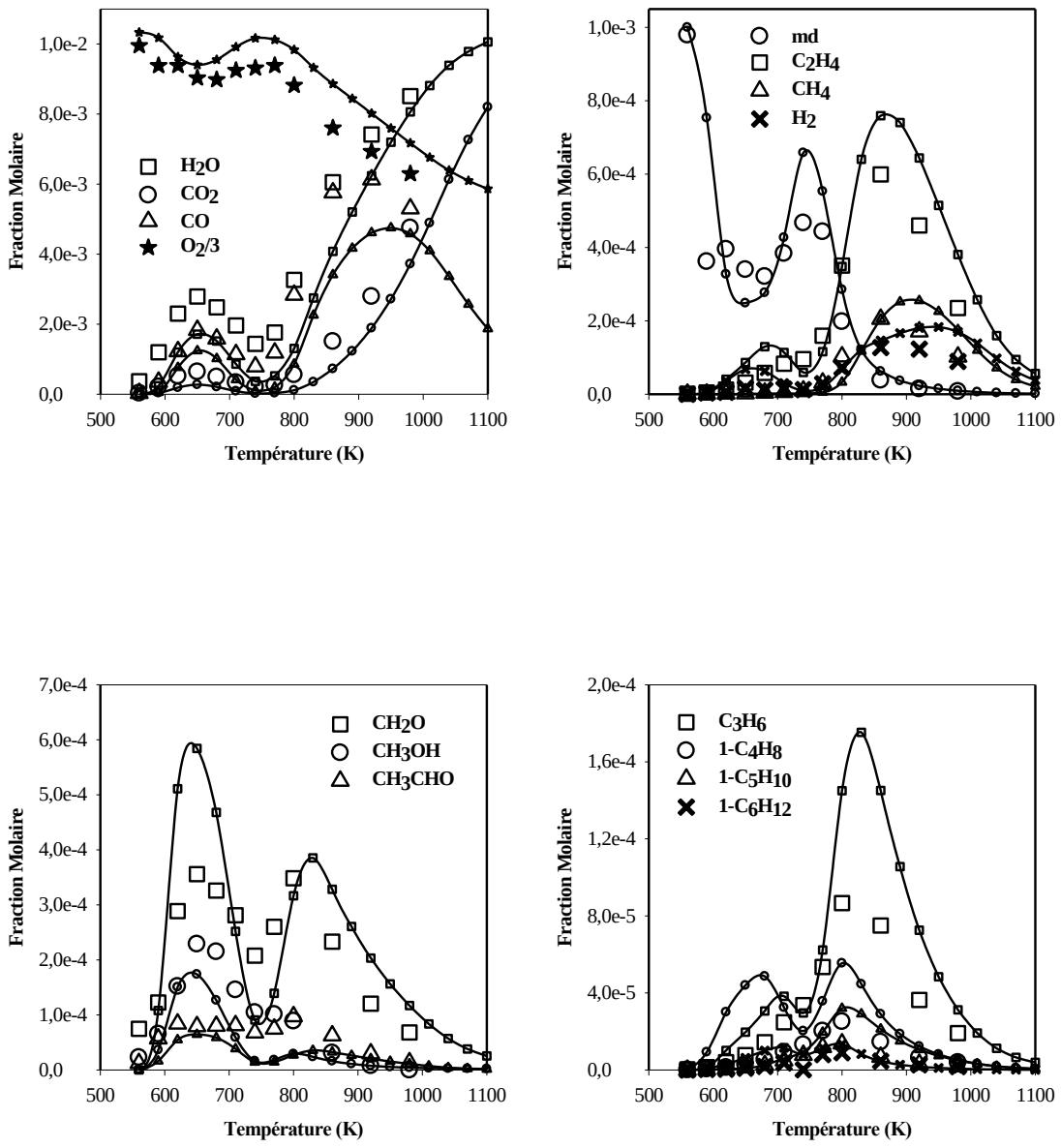


Figure V-45 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 31000 ppm de O_2, φ=0,5, τ=0,7 s

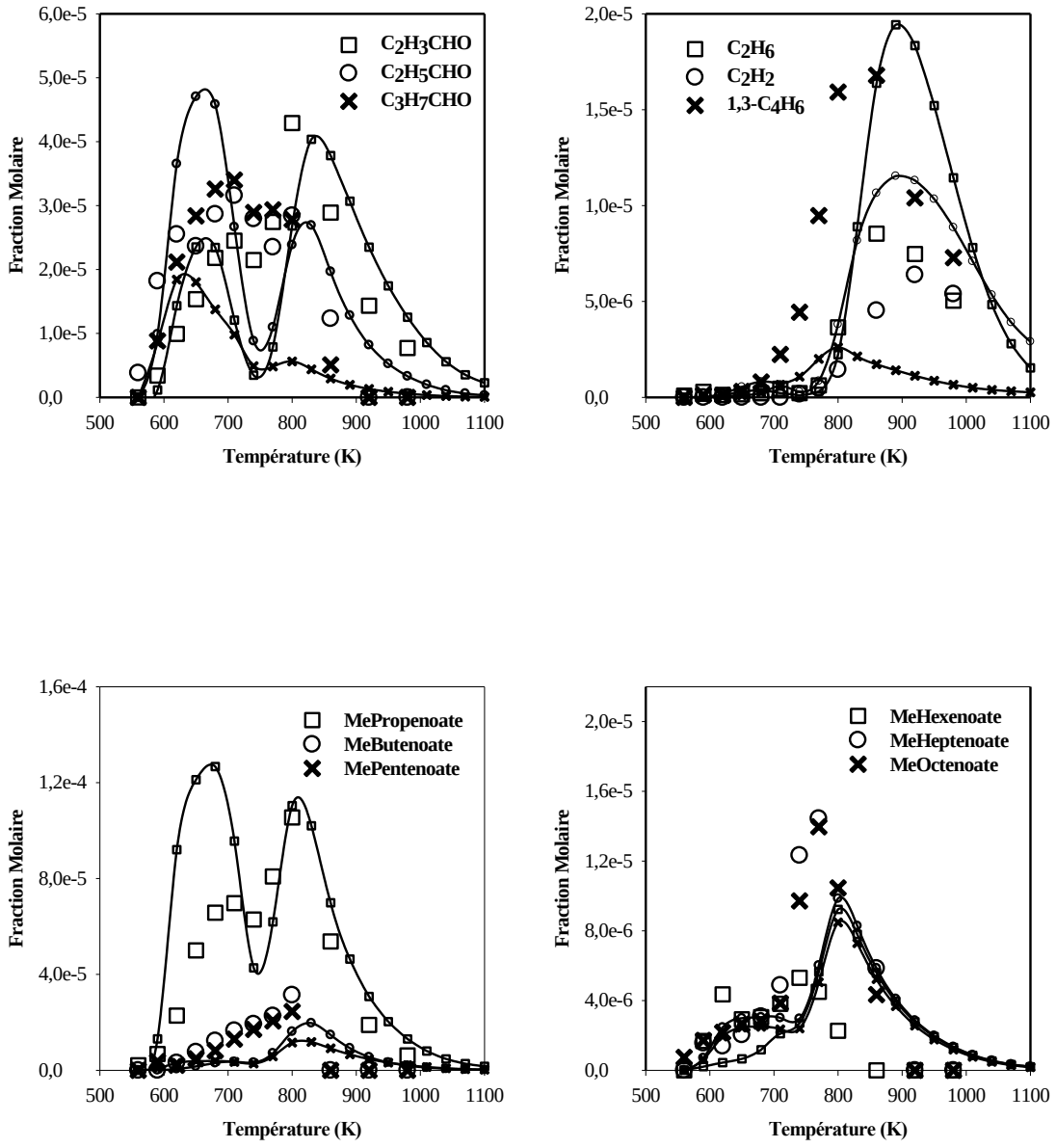


Figure V-45 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 31000 ppm de O_2, φ=0,5, τ=0,7 s

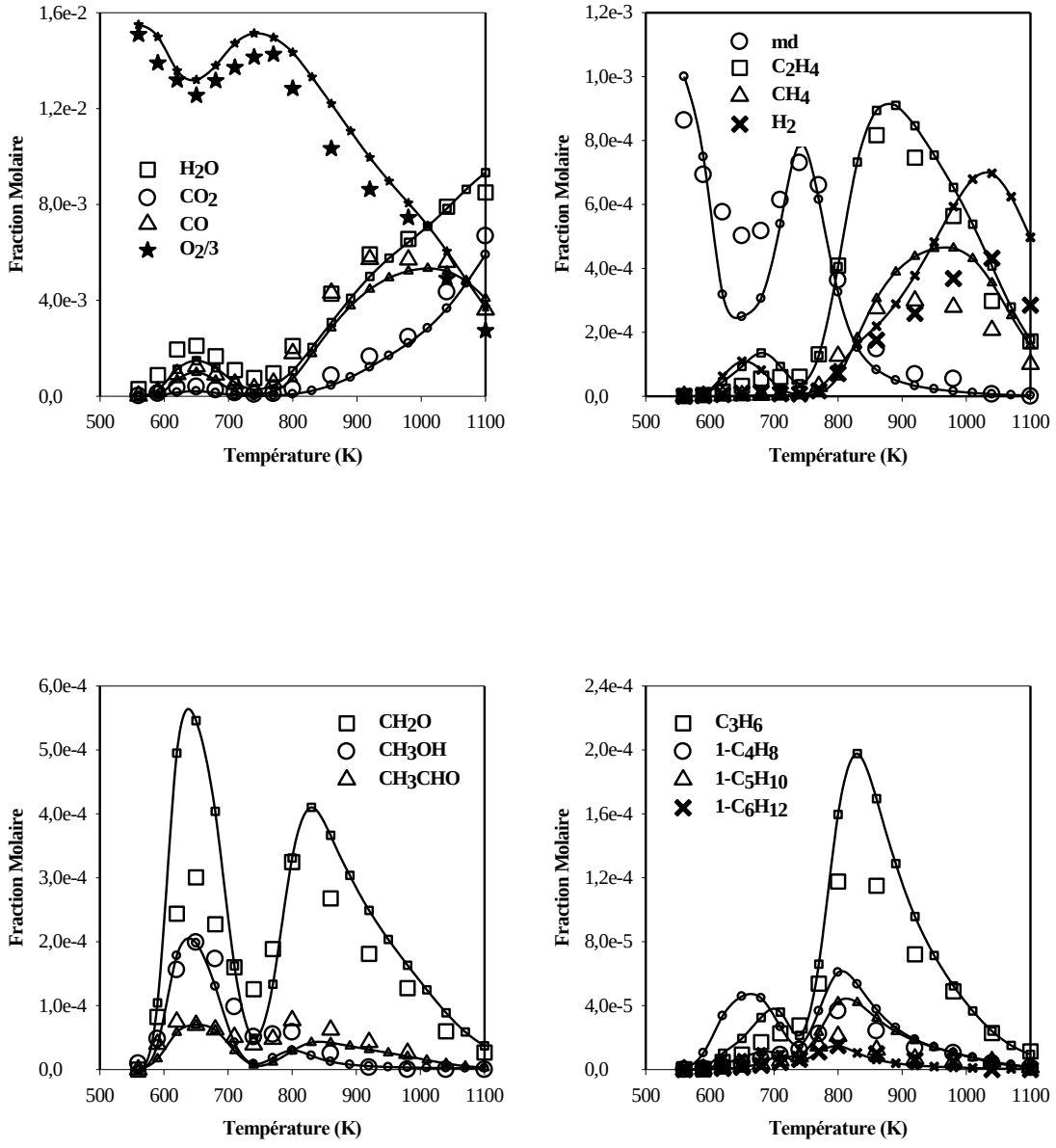


Figure V-46 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 15500 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

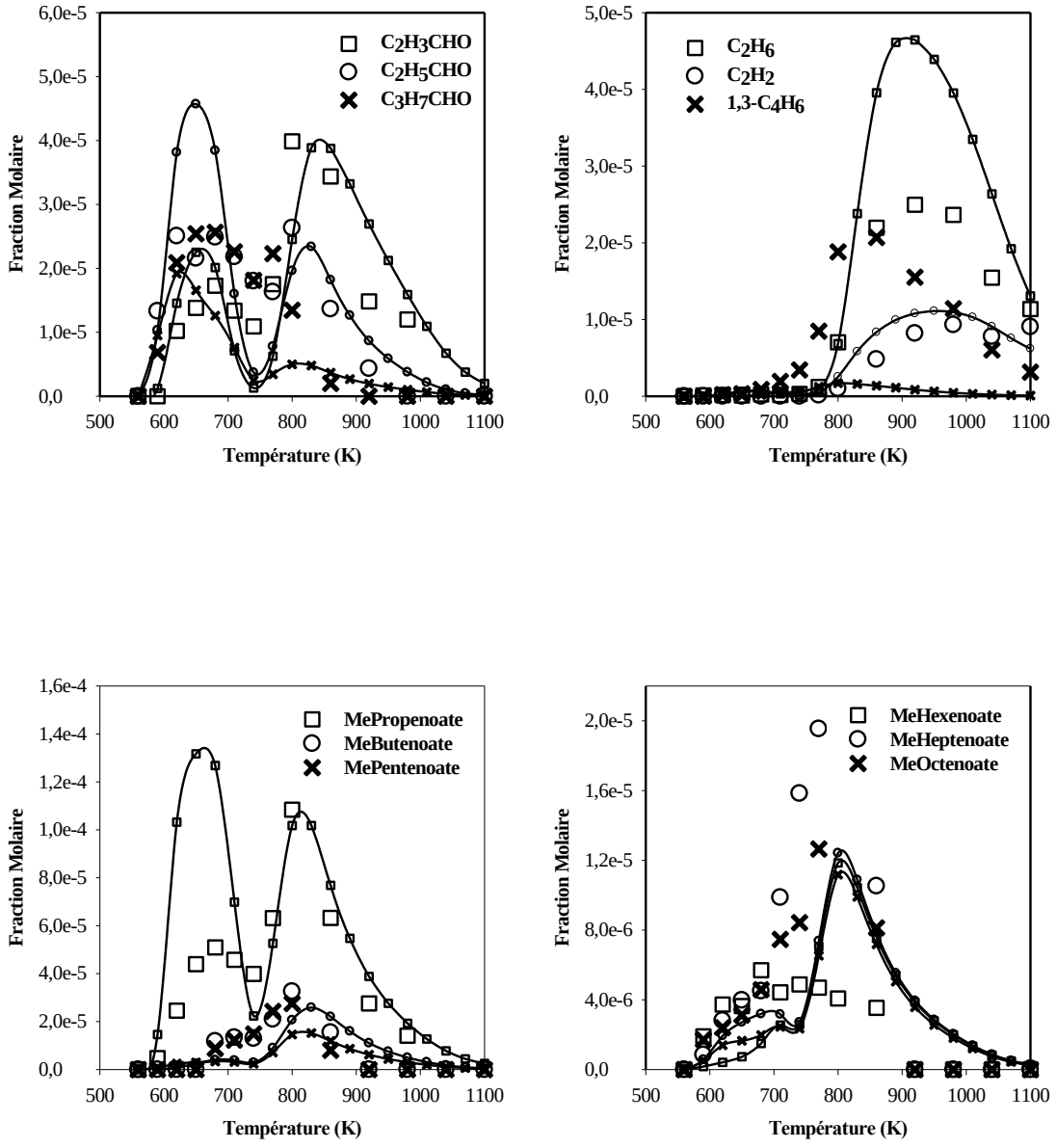


Figure V-46 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 15500 ppm de O_2, φ=1, τ=0,7 s

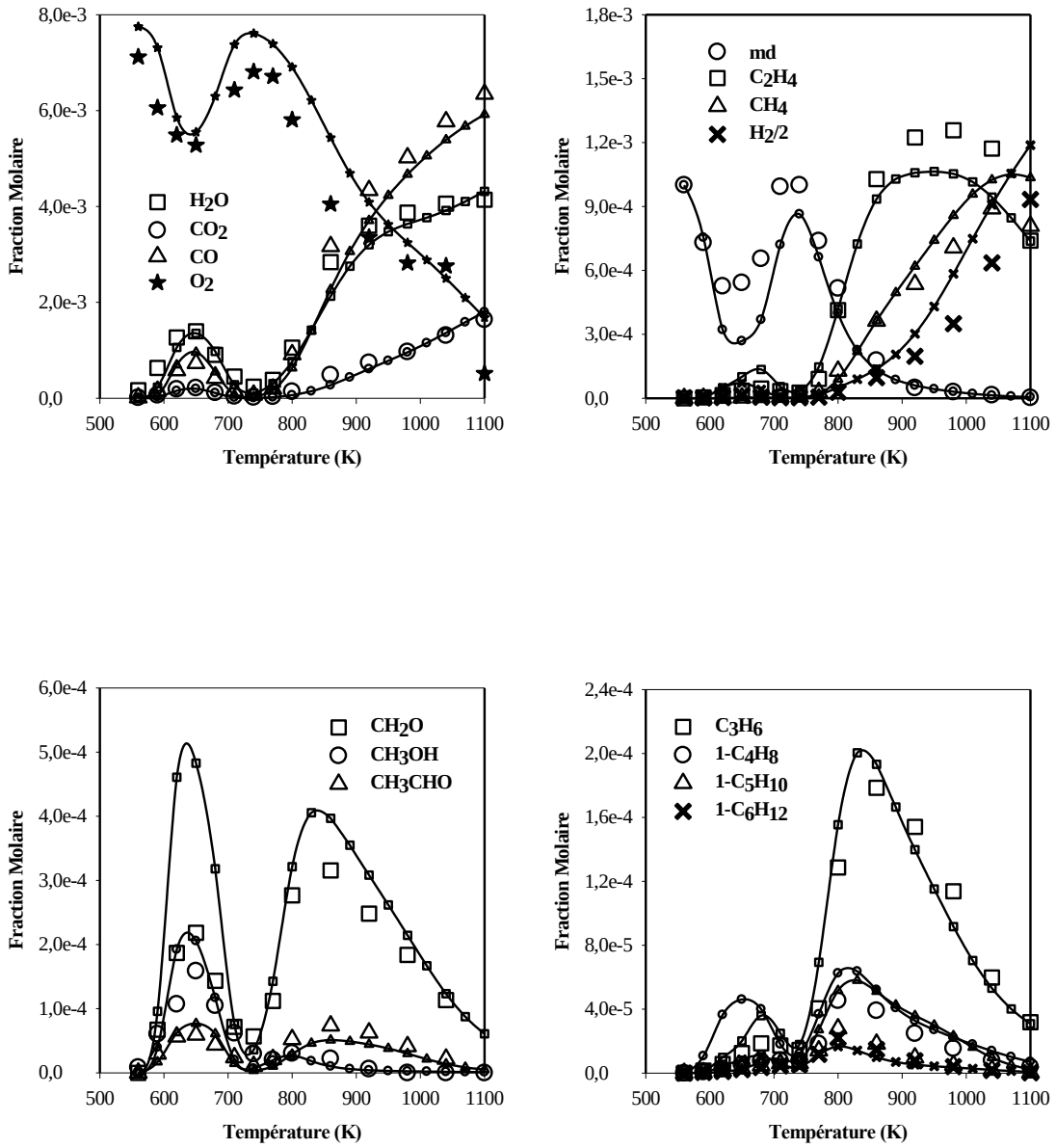


Figure V-47 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 7750 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

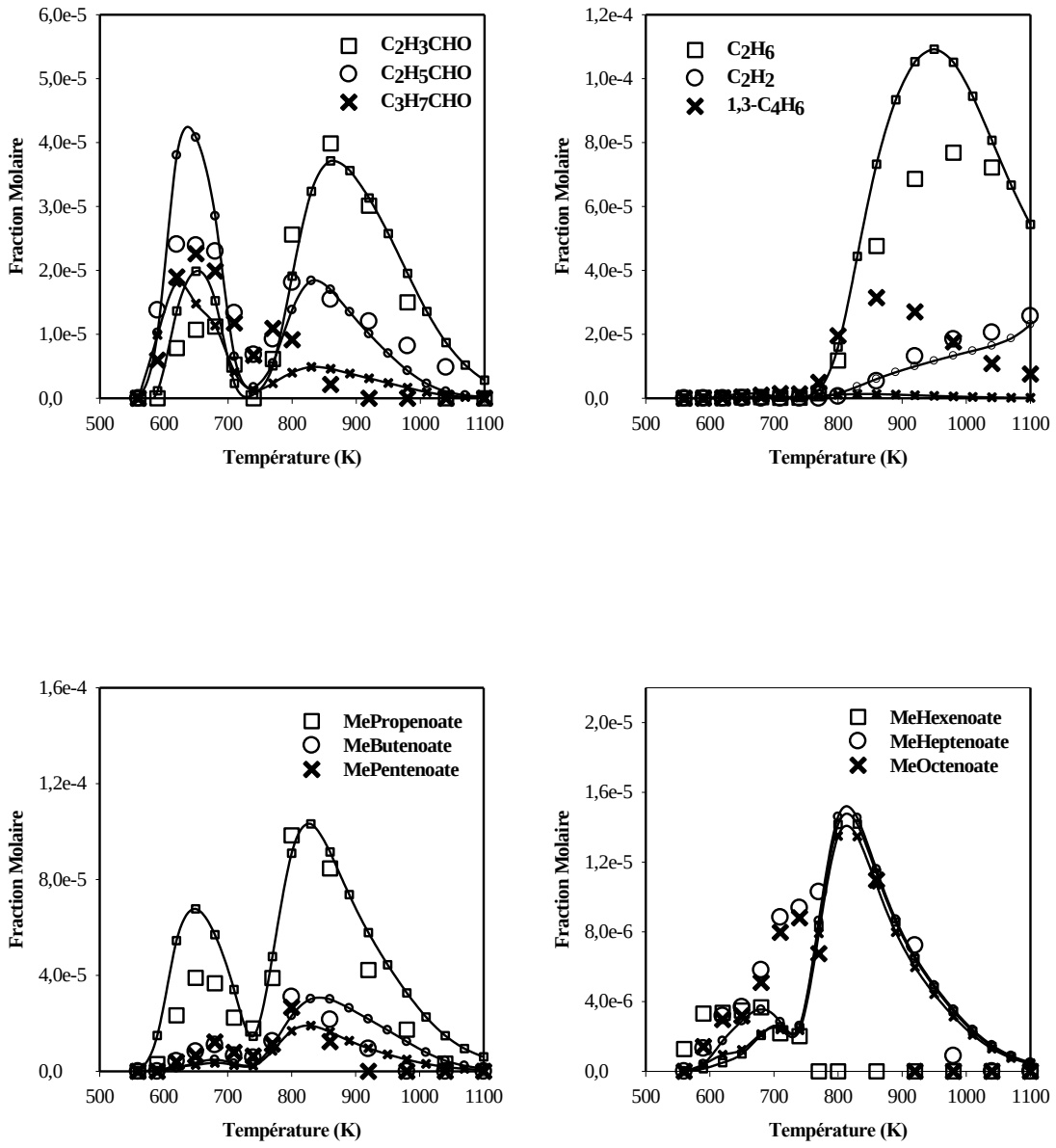


Figure V-47 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de MD, 7750 ppm de O_2, φ=2, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stoechiométrie (φ=1) et à haute pression (10 atm) afin de déterminer les chemins réactionnels majoritaires lors de l'oxydation du décanoate de méthyle.

A 650 K (cf. figure V-48), le décanoate de méthyle est majoritairement consommé par métathèse avec les radicaux hydroxyle et méthoxyle. C'est la voie principale de consommation de l'ester, elle compte pour plus de 75% de la dégradation. En raison de la facilité de la métathèse sur le carbone '2' comparativement aux autres atomes de carbone, MD2J est le radical majoritairement formé (34,2% de la consommation de l'ester). Les radicaux vont ensuite, soit fixer l'oxygène pour former des radicaux peroxy-alkyles, soit subir des réactions d'isomérisation permettant la redistribution des isomères. Les réactions d'oxydation représentent une autre voie de consommation de ces radicaux primaires d'ester méthylique, mais elles restent des voies minoritaires (<5%).

Les radicaux alkyl-esterperoxy RO_2 vont ensuite soit arracher un atome d'hydrogène au radical HO_2 pour former RO_2H, soit réagir par des réactions d'isomérisation pour former des radicaux QO_2H.

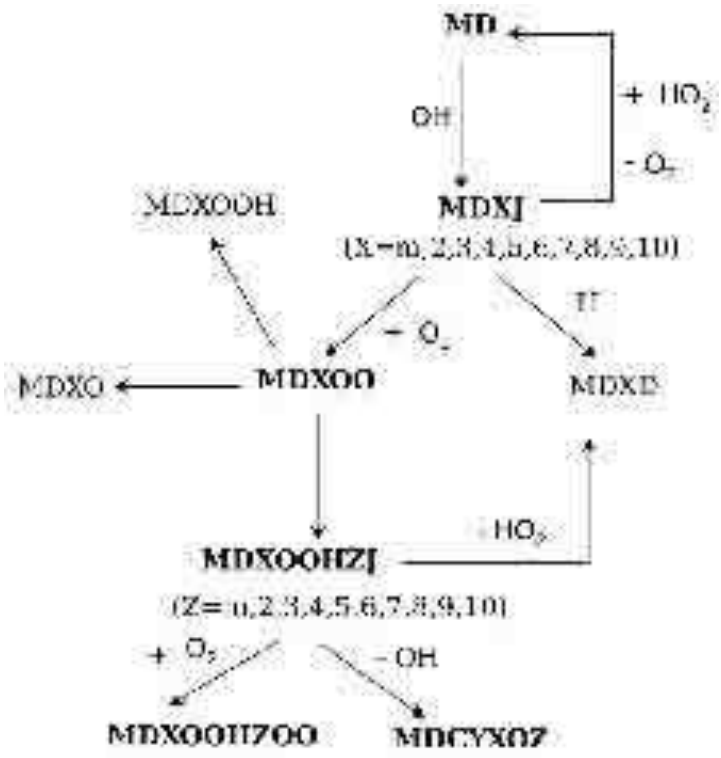


Figure V-48 : Voies de dégradations principales du décanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange décanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=650 K

La figure V-49 présente une analyse de vitesse à 950 K pour l'oxydation du décanoate de méthyle. A cette température, le décanoate de méthyle réagit principalement par métathèse avec les radicaux OH et H pour former les différents radicaux MDXJ.

Ces radicaux MDXJ peuvent ensuite réagir selon 3 voies différentes. Ils peuvent d'abord s'isomériser, donnant un autre radical alkyl-ester (redistribution des isomères). L'importance de

cette voie est variable, mais peu représentée jusqu'à 4/5 de la consommation du radical (cas du MD6J). La deuxième voie est celle de la décomposition par rupture de liaison C-C formant un ester insaturé inférieur et un radical 1-alkyl et la rupture de liaison C-O, donnant le formaldéhyde et un autre radical. L'importance de cette voie de décomposition est également variable. Enfin, la troisième voie est celle aboutissant à la formation des décénoates, qui a lieu exclusivement par une réaction d'oxydation. Cependant, une faible proportion des radicaux alkyl-esters réagit par cette voie.

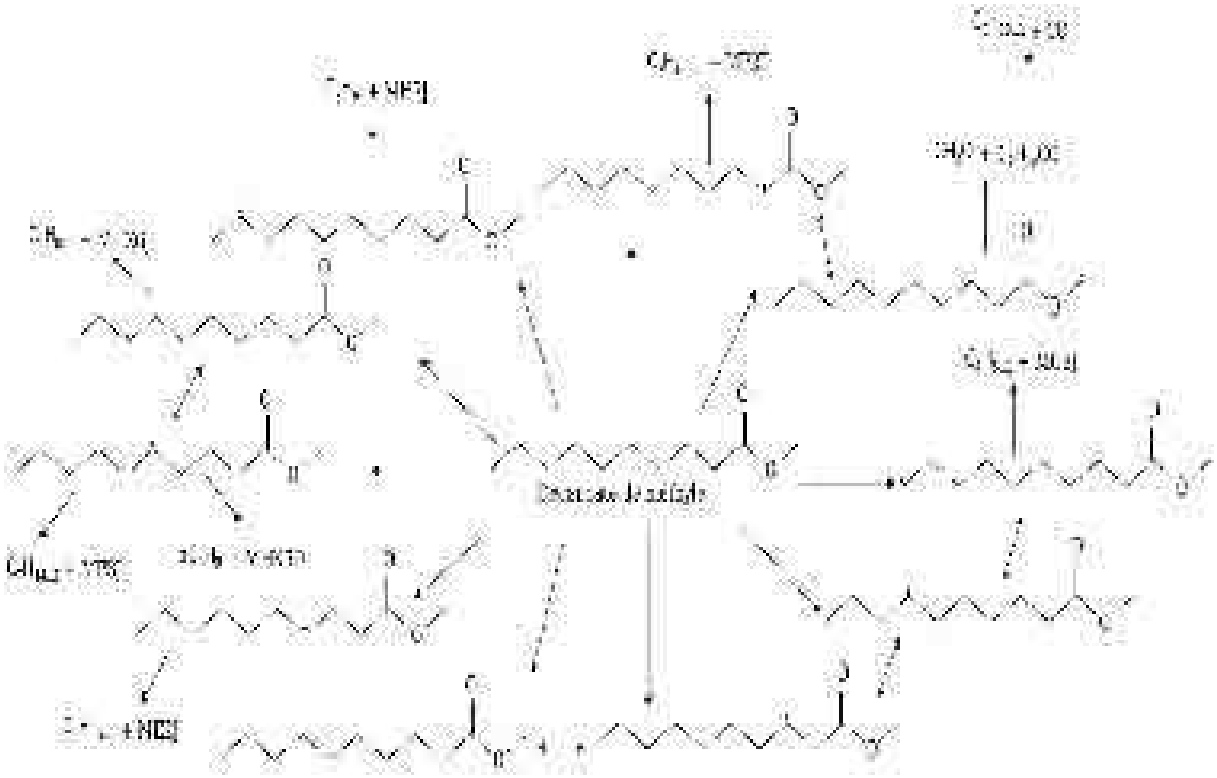


Figure V-49 : Voies de dégradations principales du décanoate de méthyle lors de l'oxydation d'un mélange décanoate de méthyle/oxygène/azote (P=10 atm, φ=1) en réacteur auto-agité à T=950 K

- Analyse de sensibilité

Afin de mettre en évidence l'influence des réactions proposées, nous avons réalisé une analyse de sensibilité sur le décanoate de méthyle, dans le cas d'un mélange stoechiométrique (φ=1,0). Il est important de rappeler qu'un coefficient positif (ou négatif) attribué à chaque réaction traduit la sensibilisation de la formation (ou de la consommation) de l'espèce par augmentation de la constante de vitesse associée.

La figure V-49 représente cette analyse de sensibilité à une température de 650 K réalisée grâce

à notre modèle. Les réactions les plus sensibles sont les réactions de métathèse de l'ester avec le radical OH et CH_3O. Ces réactions de métathèse favorisent la consommation du décanoate de méthyle. Parmi les réactions inhibitrices (réactions qui présentent un coefficient de sensibilité positif), on remarque que l'effet de la réaction $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$ est fortement marqué. Elle ralentit la consommation du décanoate de méthyle en consommant une proportion importante de radicaux OH très réactifs.

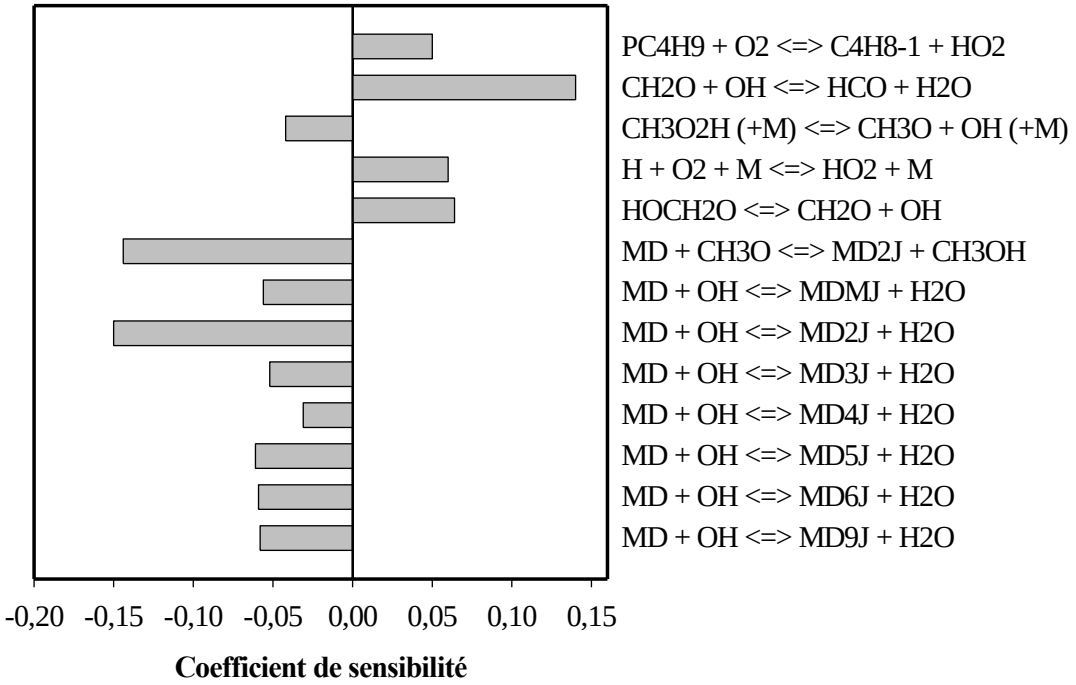


Figure V-50 : Coefficient de sensibilité pour le décanoate de méthyle lors de l'oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à T=650 K, à 10 atm et φ=1

La figure V-51 présente une analyse de sensibilité toujours à une richesse de 1, mais à température de 950 K pour l'oxydation du décanoate de méthyle. A cette température, on remarque que les réactions les plus influentes sont plus nombreuses qu'à T=650 K. Les réactions les plus sensibles restent les réactions de métathèse avec le radical OH. Par ailleurs, les réactions de la base C_0-C_2 sont très influentes, en particulier les réactions $2\ HO_2 \rightleftarrows H_2O_2 + O_2$, $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_4 + O_2$, $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$ qui ont un effet inhibiteur sur la consommation du décanoate de méthyle. La réaction $CH_2O + HO_2 \rightleftarrows HCO + H_2O_2$ présente un coefficient de sensibilité négatif.

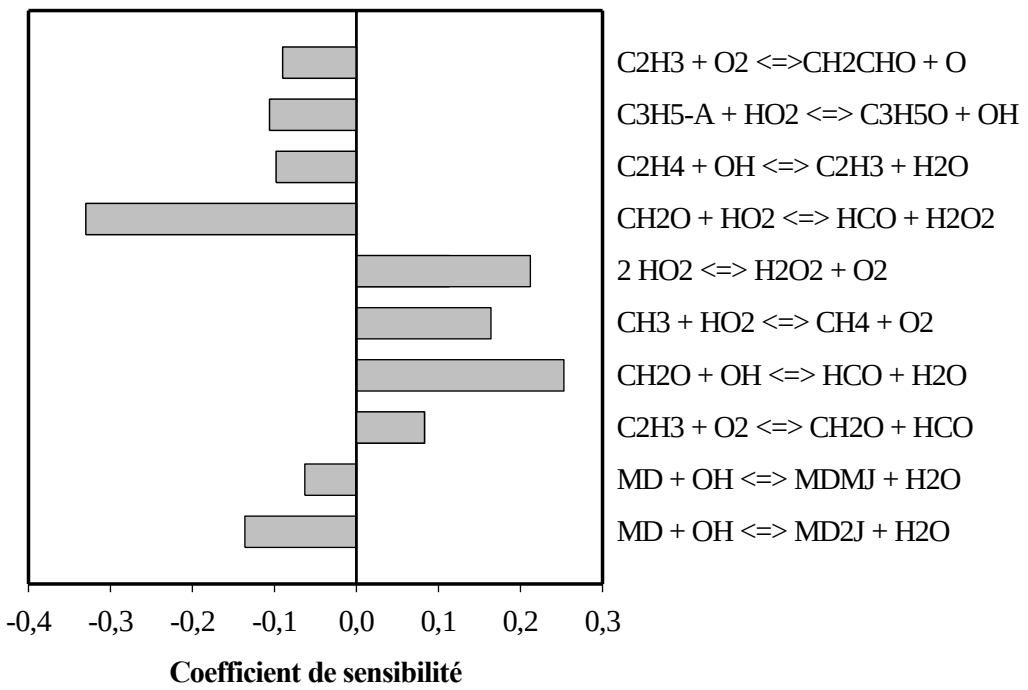


Figure V-51 : Coefficient de sensibilité pour le décanoate de méthyle lors de l'oxydation du décanoate de méthyle en réacteur auto-agité à T=950 K, à 10 atm et φ=1

Conclusion sur l'oxydation des esters à chaîne alkyle saturée

Dans cette première partie de ce chapitre, nous avons présenté des résultats sur l'oxydation des esters saturés à chaîne alkyle courte et longue dans un large domaine de tempétrature (560-1250 K), de richesse (0,3-2) et à haute pression (10 atm). Diverses espèces intermédiaires et finales ont été identifiées et quantifiées. Pour les esters à chaîne alkyle courte, nous n'avons pas observé une réactivité à basse température (ca. 560-770 K), par contre les esters à longue chaîne alkyle présentaient une zone de flamme froide.

Nous avons développé un mécanisme d'oxydation détaillé des esters étudiés et effectué des simulations afin de les comparer à nos résultats expérimentaux. Le modèle réproduit bien nos données expérimentales à haute température (>770 K) ; en revanche dans le domaine de basse température (ca. 560-770 K), des divergences apparaissaient notamment pour le nonanoate et le décanoate de méthyles.

2. Etude expérimentale de l'oxydation d'esters méthyliques insaturés

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons étudié les esters méthyliques à chaîne latérale saturée. A l'issue de cette partie, nous avons décidé d'étudier quelques esters méthyliques comportant une insaturation. Nous nous sommes limité à l'étude expérimentale de l'oxydation du hex-3-énoate de méthyle, du oct-2-énoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle.

2.1 Oxydation du hex-3-énoate de méthyle.

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du hex-3-énoate de méthyle a été étudiée en réacteur auto-agité dans les conditions expérimentales résumées dans le tableau V-9.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MHX3D} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$15{,}00.10^{-3}$	$9{,}840.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$9{,}00.10^{-3}$	$9{,}900.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$4{,}50.10^{-3}$	$9{,}945.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-9 : Oxydation du hex-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les profils de concentration des principaux composés quantifiés lors de l'oxydation du hex-3-énoate de méthyle (MHX3D) sont représentés sur les figures V-52 à V-54.

Les principales espèces intermédiaires sont comme pour l'oxydation de l'hexanoate de méthyle le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, l'éthylène, le méthane et l'hydrogène.

L'acétaldéhyde, le propanal, le prop-2-énal, le butanal, l'éthane, le propène, l'acétylène, le but-1-ène, le buta-1,3-diène sont également détectés, mais en faible proportion.

Sur les profils du hex-3-énoate de méthyle, on peut remarquer que ce dernier ne réagit pratiquement pas à basse température (<770 K) quelque que soit la richesse. Cette baisse de réactivité par rapport à l'ester saturé correspondant peut s'expliquer par une diminution des processus de ramification issus de la peroxydation des radicaux formés par métathèses sur le carburant.

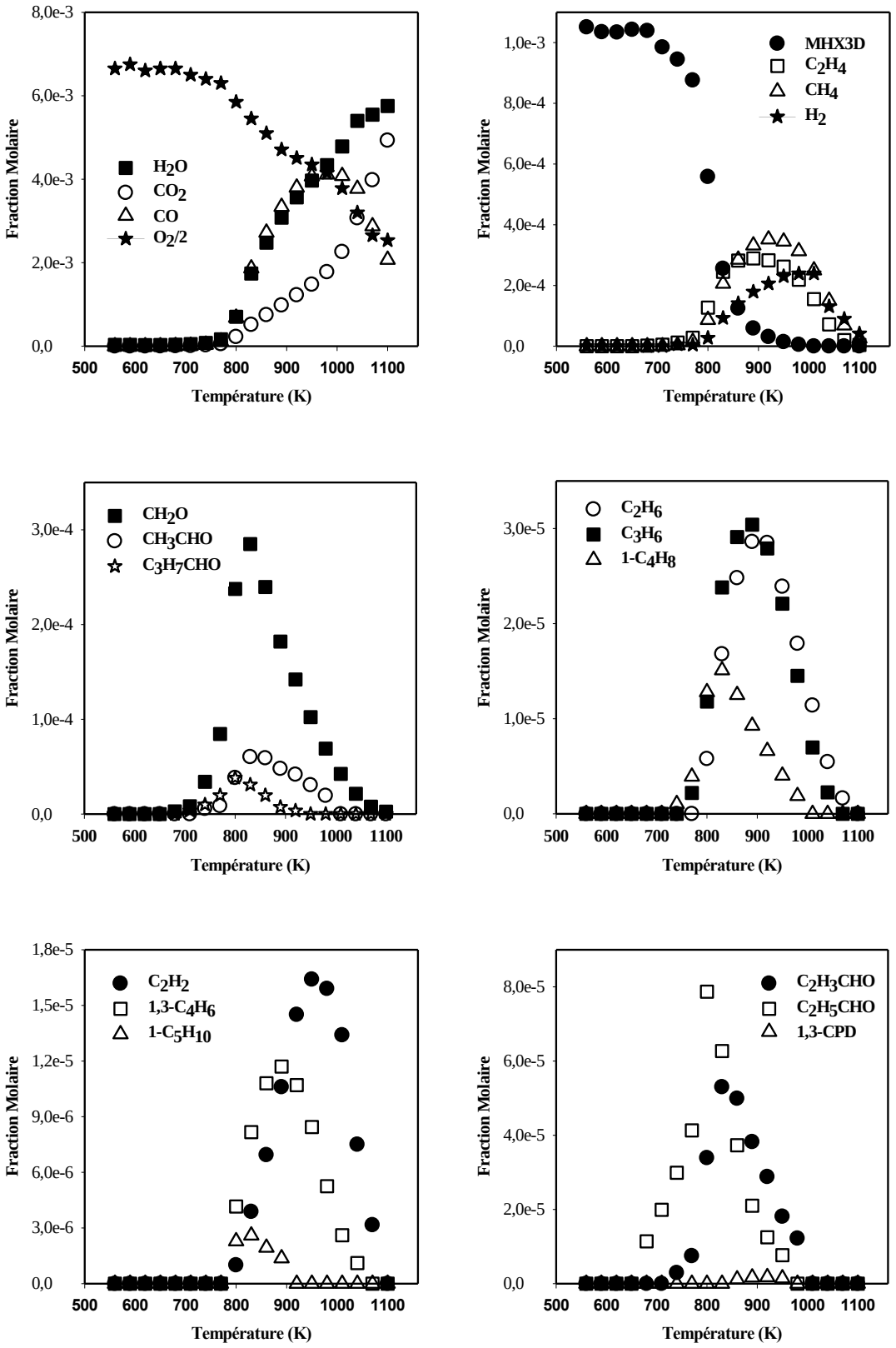


Figure V-52 : Oxydation du hex-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MHX3D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

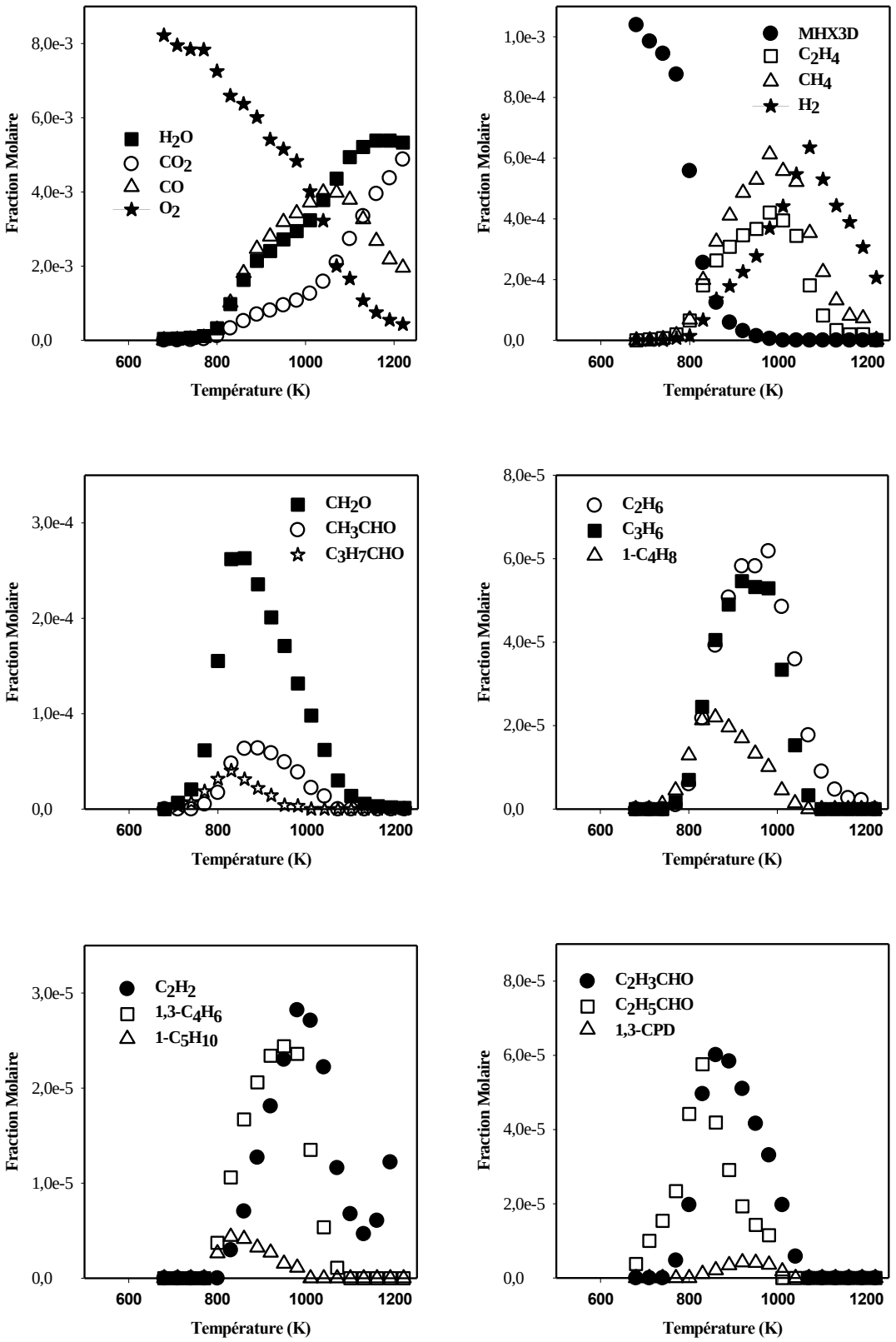


Figure V-53 : Oxydation du hex-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MHX3D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

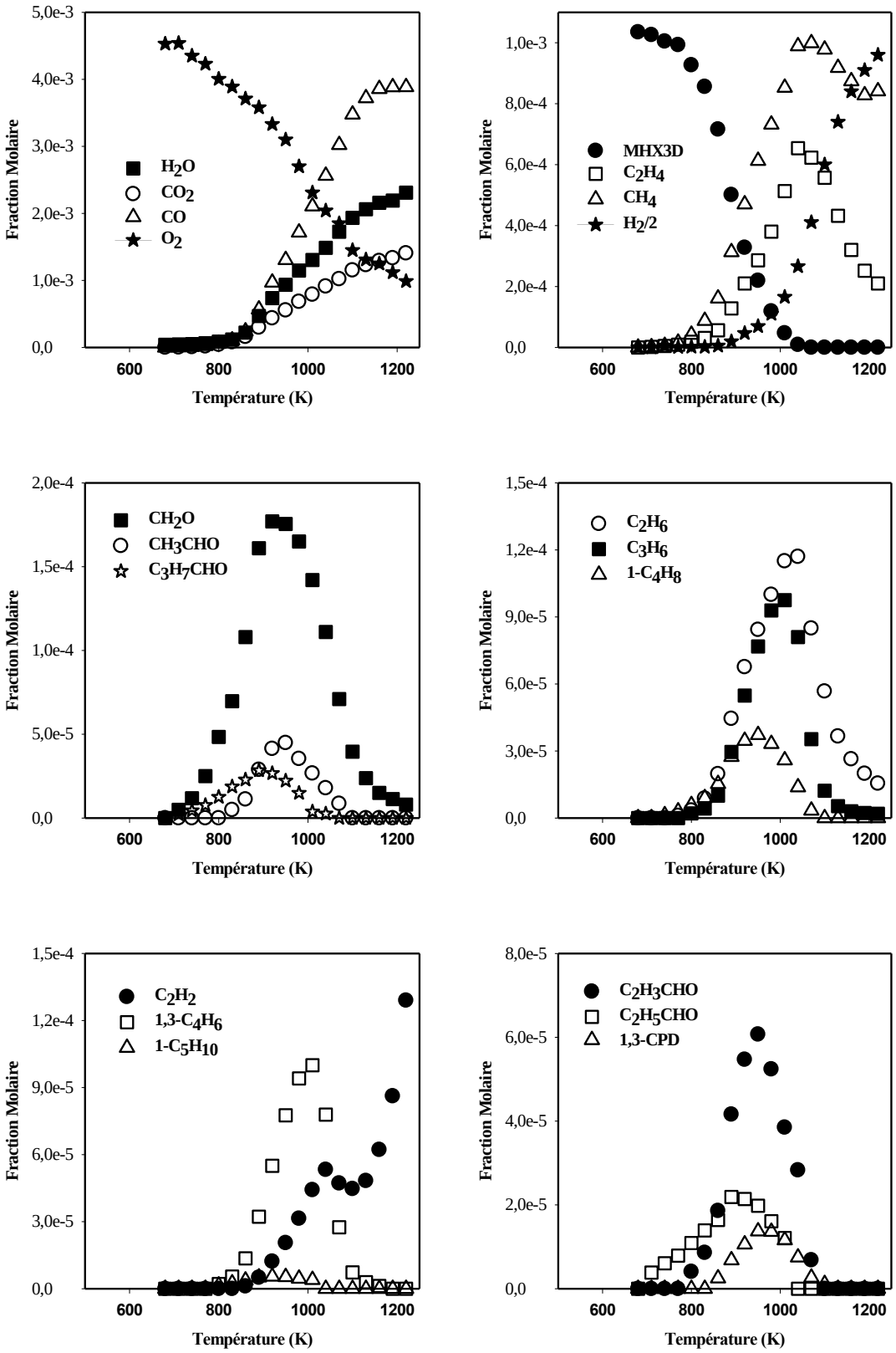


Figure V-54 : Oxydation du hex-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MHX3D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7s

2.3 Oxydation du oct-2-énoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

L'oxydation de l'oct-2-énoate de méthyle a été réalisée dans les conditions expérimentales regroupées dans le tableau V-10.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{MO2D} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$20{,}00.10^{-3}$	$9{,}790.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$12{,}00.10^{-3}$	$9{,}870.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}00.10^{-3}$	$9{,}930.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-10 : Oxydation de l'oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les résultats obtenus lors de l'oxydation de l'oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité à 10 atm sont représentés sur les figures V-55 à V-57. Les expériences nous ont permis d'obtenir des profils de concentration des réactifs, produits et principales espèces intermédiaires.

Les produits détectés majoritairement sont le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'éthylène, le méthane, l'hydrogène, le formaldéhyde, le méthanol, l'acétaldéhyde et le propène. Ceux en plus faible quantité sont l'acétylène, l'éthane, le but-1-ène, le buta-1,3-diène et le pent-1-ène.

En observant le profil de concentration de l'oct-2-énoate de méthyle, on remarque une faible réactivité entre 560 et 770 K. Cette faible réactivité se traduit également par de faibles quantités de CO et CO_2 dans cette zone. Au-delà, la concentration du oct-2-énoate de méthyle chute rapidement jusqu'à devenir nulle vers 900 K alors que dans le même temps celles des espèces à un ou 2 atomes de carbone augmentent.

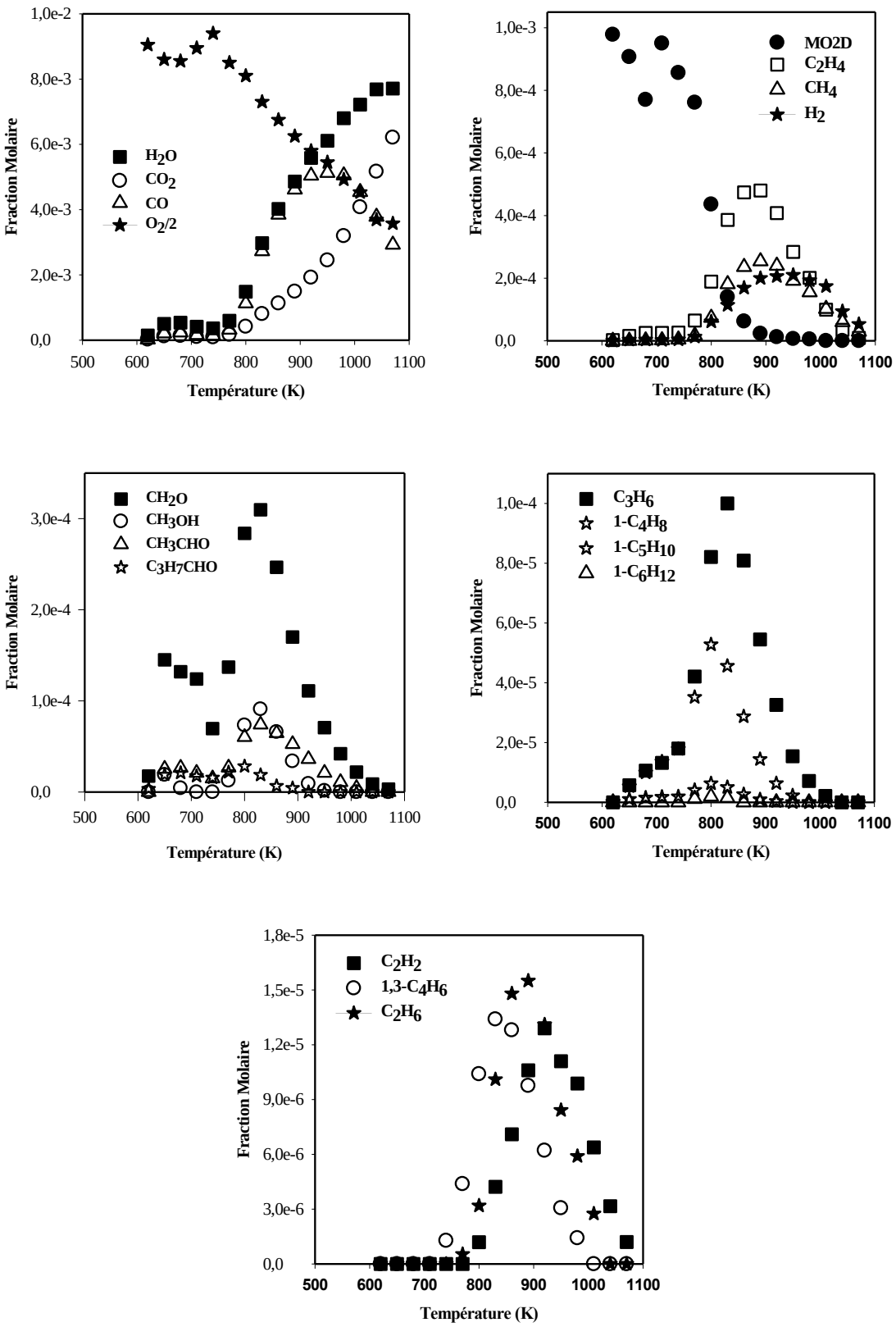


Figure V-55 : Oxydation du oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MO2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

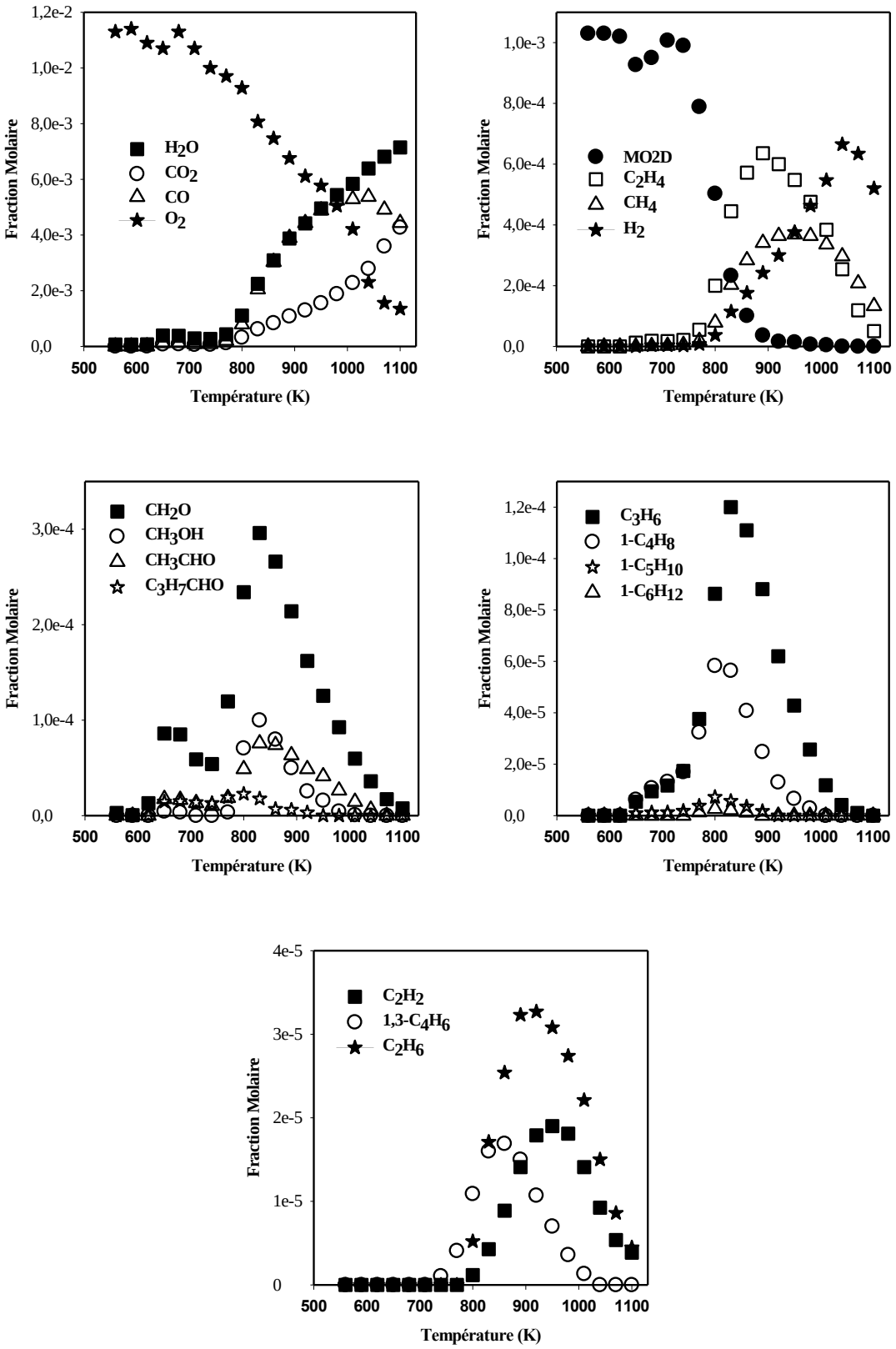


Figure V-56 : Oxydation du oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MO2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

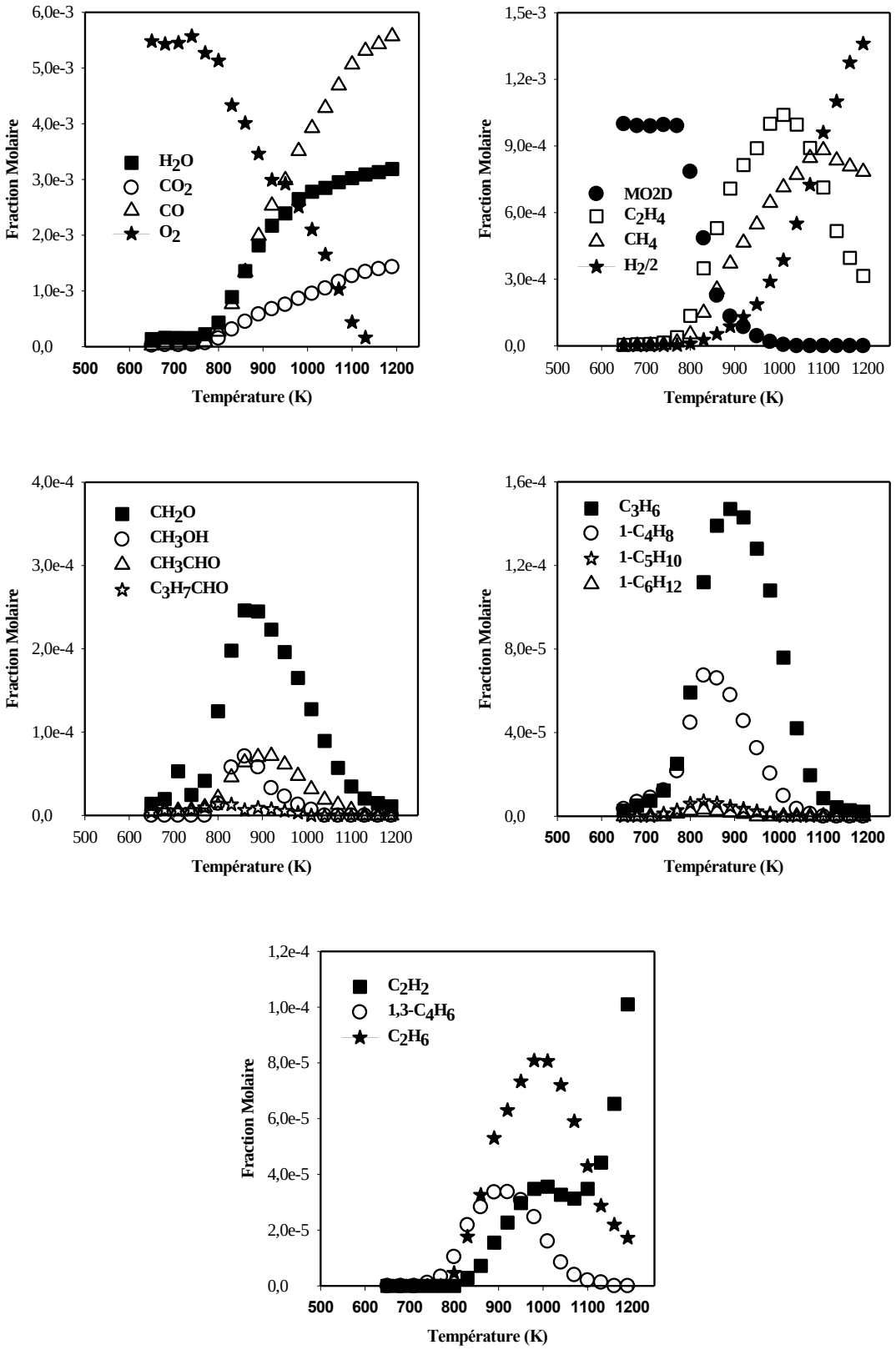


Figure V-57 : Oxydation du oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MO2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7s

2.4 Oxydation du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle

a) Conditions expérimentales

L'oxydation des non-2-énoate de méthyle et non-3-énoate de méthyle a été étudiée en réacteur auto-agité à 10 atm. Les deux composés étant des isomères, les fractions molaires initiales d'O_2 et de N_2 sont identiques. Ainsi, les conditions d'étude de ces deux composés sont présentées dans le même tableau V-11.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{(MN2D\ ou\ MN3D)}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$22{,}50.10^{-3}$	$9{,}765.10^{-1}$	0,6	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$13{,}50.10^{-3}$	$9{,}855.10^{-1}$	1	560-1160
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}75.10^{-3}$	$9{,}923.10^{-1}$	2	560-1160

Tableau V-11 : Oxydations du non-2-énoate de méthyle et non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

❖ Oxydation du non-2-énoate de méthyle

Les différents profils des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables sont présentés d'une part sur les figures V-58 à V-60 pour l'oxydation du non-2-énoate de méthyle et d'autre part sur les figures V-61 à V-63 pour l'étude du non-3-enoate de méthyle.

Les espèces intermédiaires majoritaires sont les mêmes pour ces deux isomères. Il s'agit du monoxyde de carbone, de l'hydrogène, du méthane, de l'éthylène, du formaldéhyde, de l'acétaldéhyde, et du méthanol.

D'autres espèces ont également été identifiées. Parmi les espèces détectées, on peut citer l'éthane, l'acétylène, le propène, le buta-1,3-diène, le but-1-ène, le pent-1-ène, le hex-1-ène, le hept-1-ène, les aldéhydes plus lourdes (butanal, but-2-énal, pentanal, hexanal, heptanal, oct-2-énal) et les esters méthyliques insaturés plus légers (prop-2-énoate et but-3-énoate de méthyles).

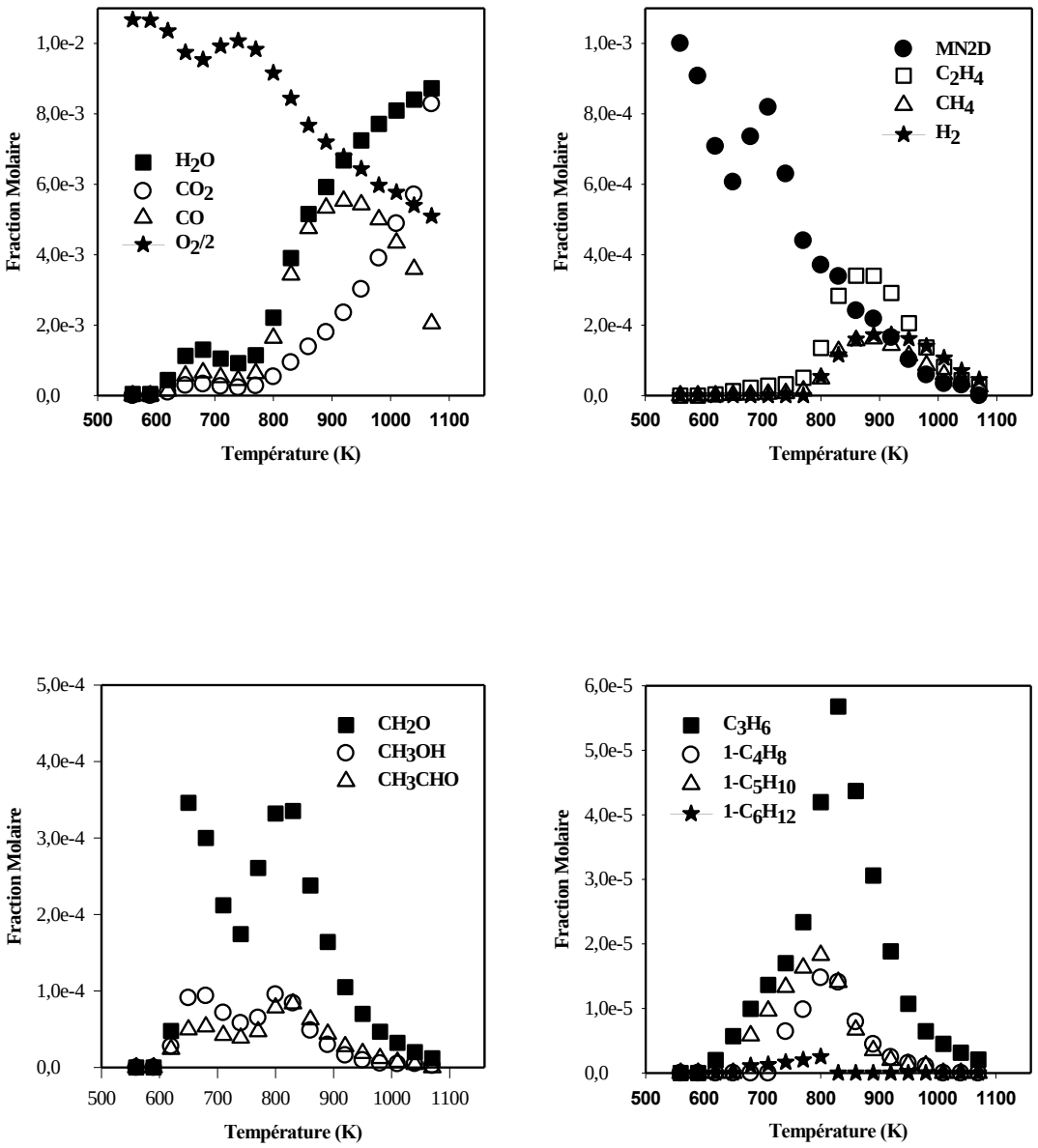


Figure V-58 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

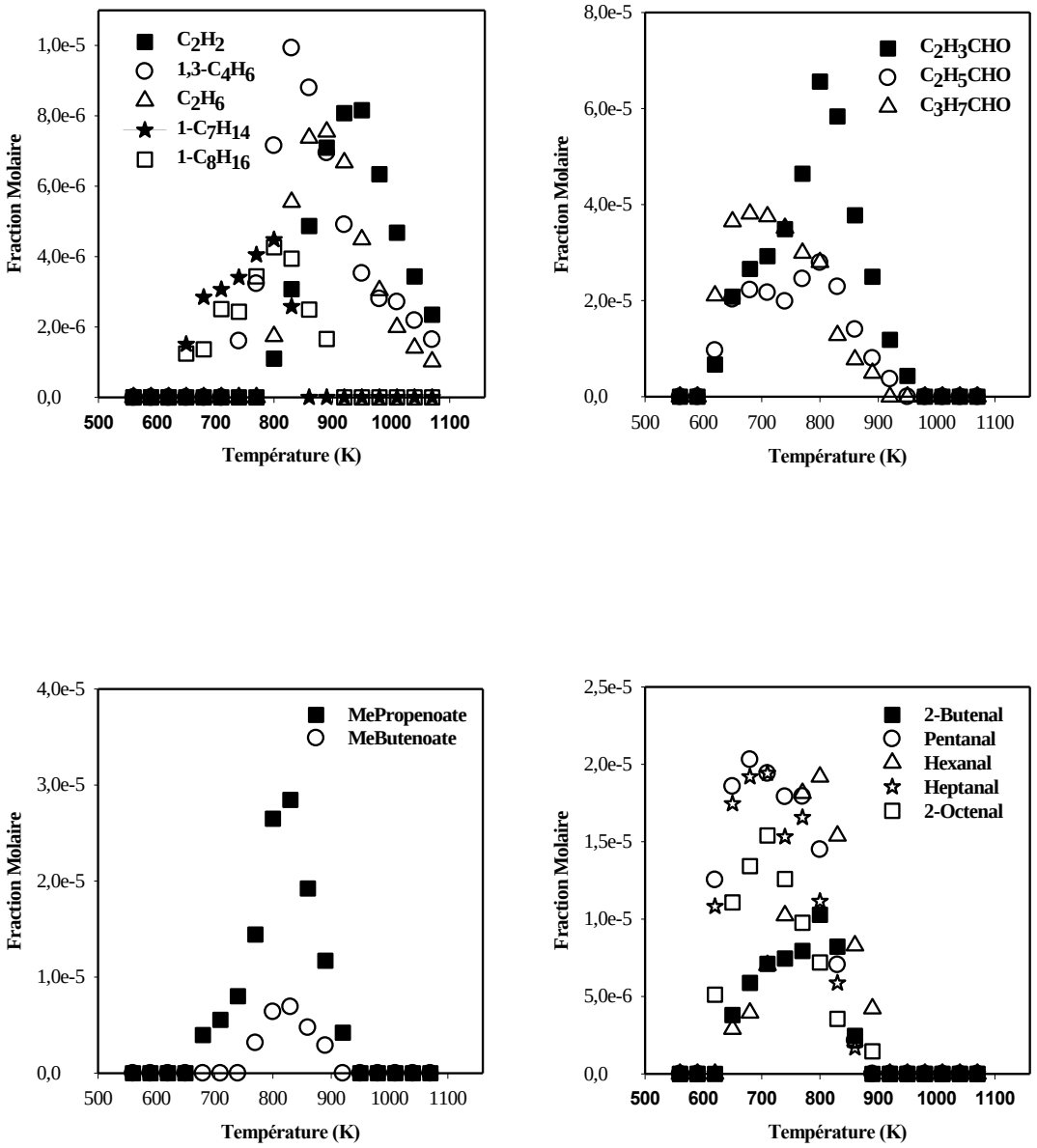


Figure V-58 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

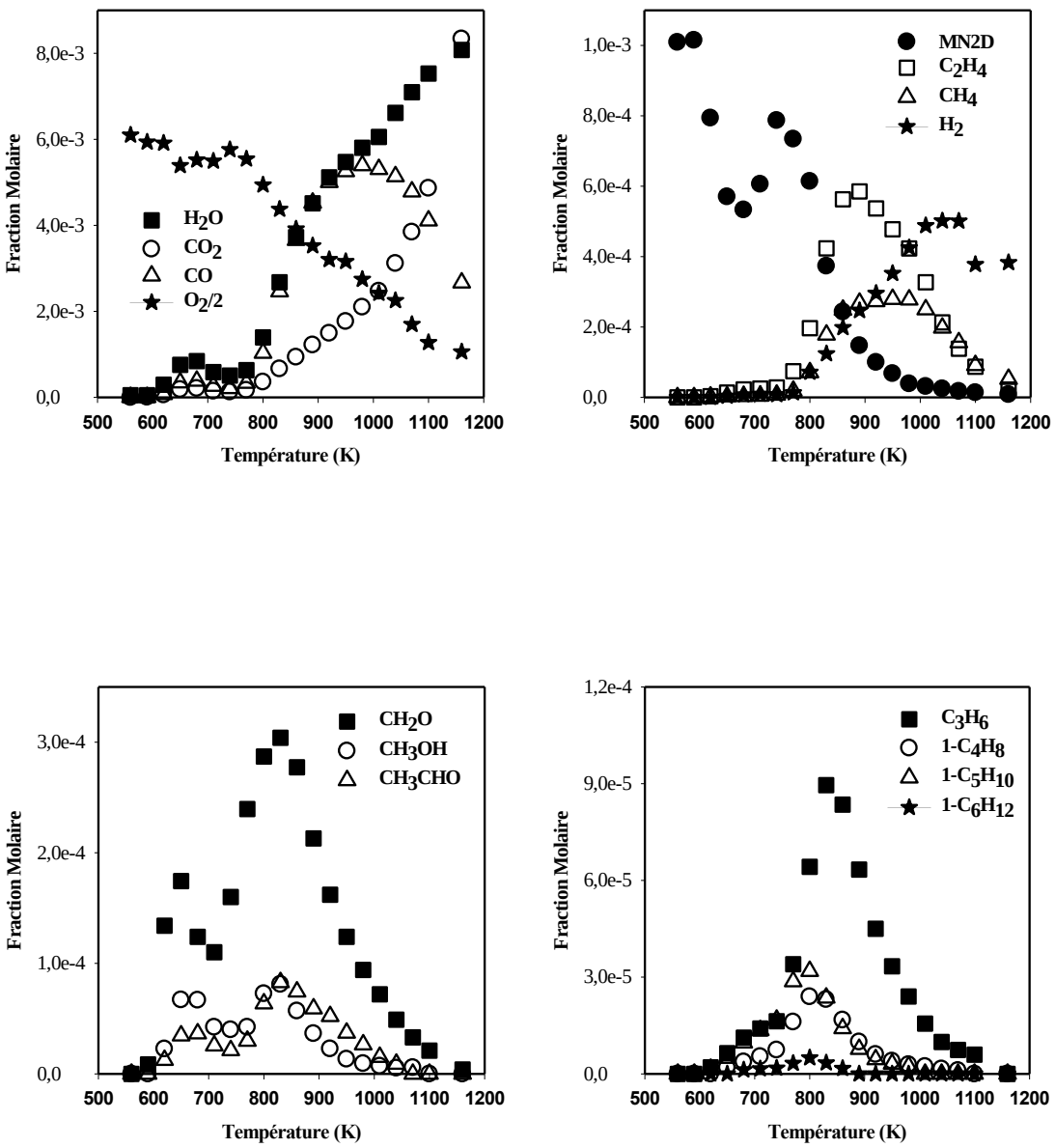


Figure V-59 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

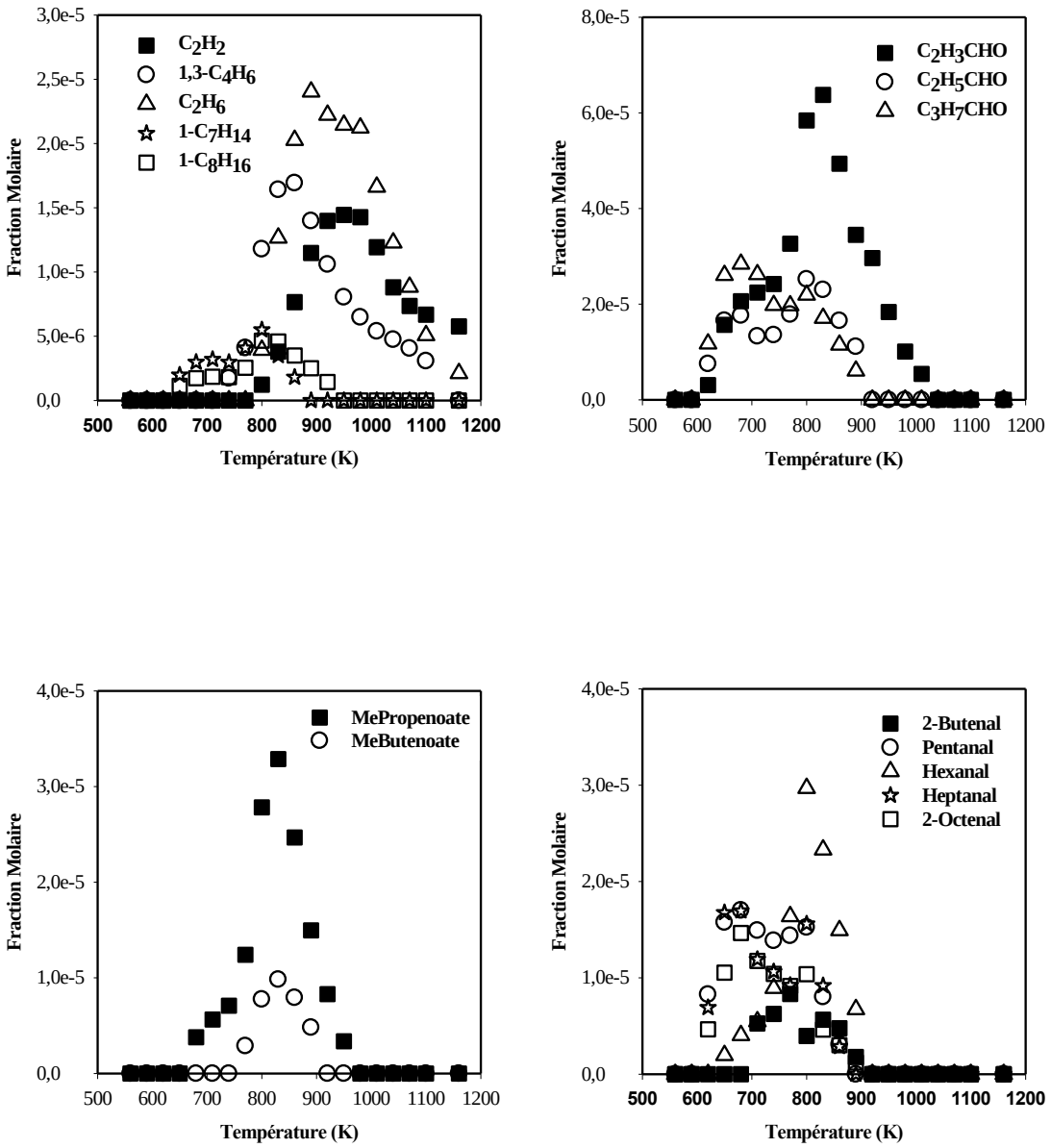


Figure V-59 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

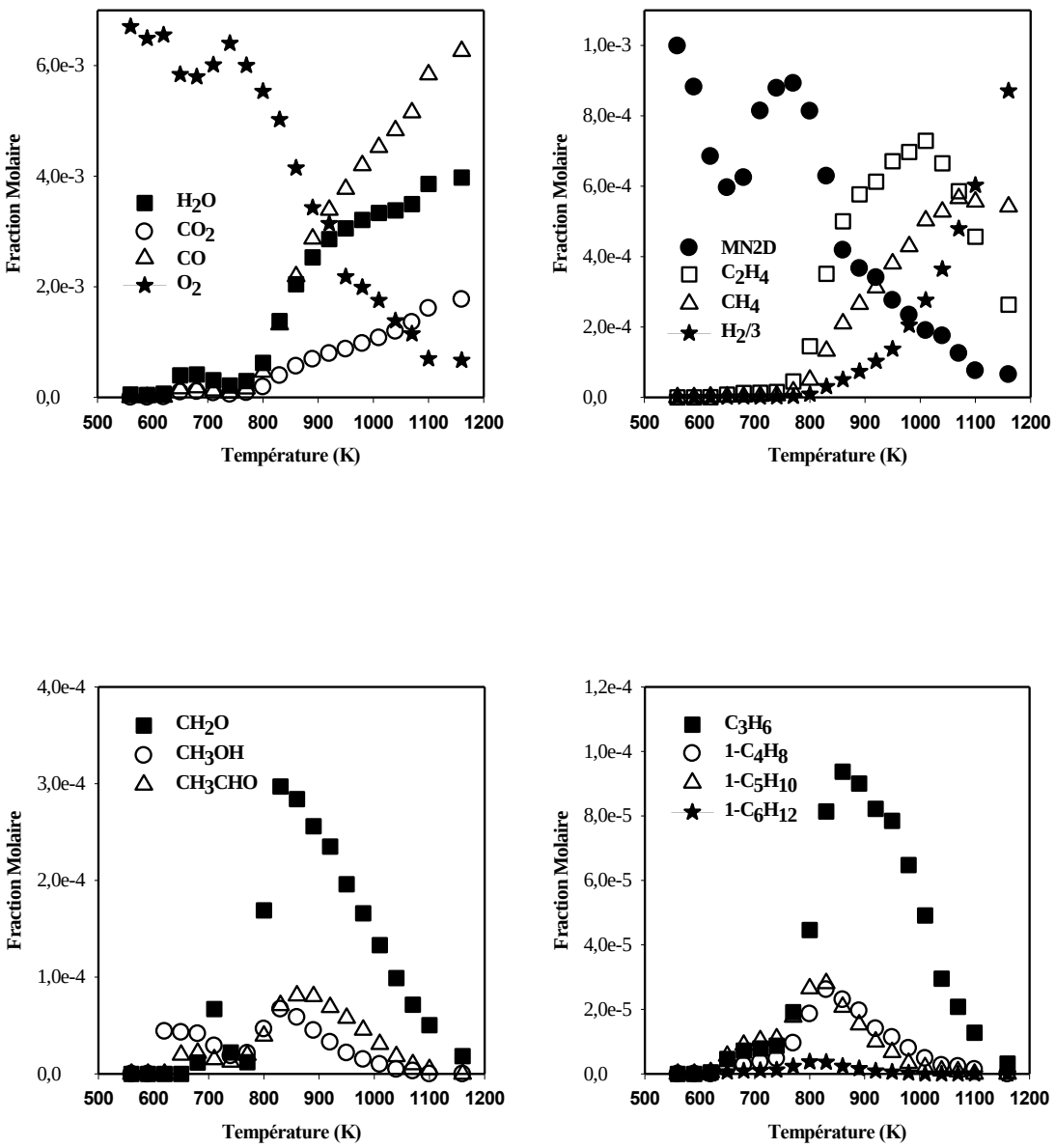


Figure V-60 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2,0 ; τ=0,7s

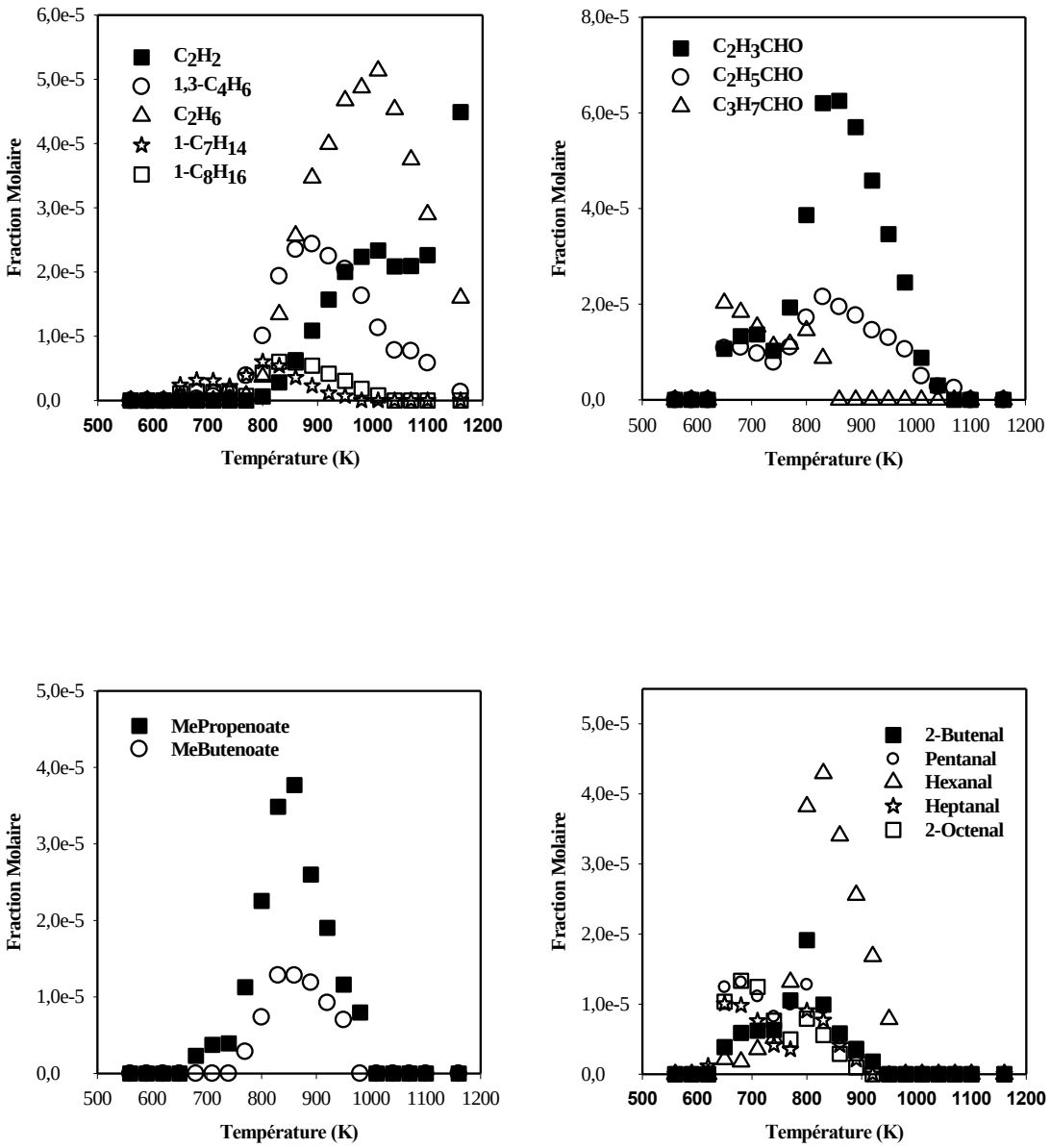


Figure V-60 : Oxydation du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7s

❖ Oxydation du non-3-énoate de méthyle

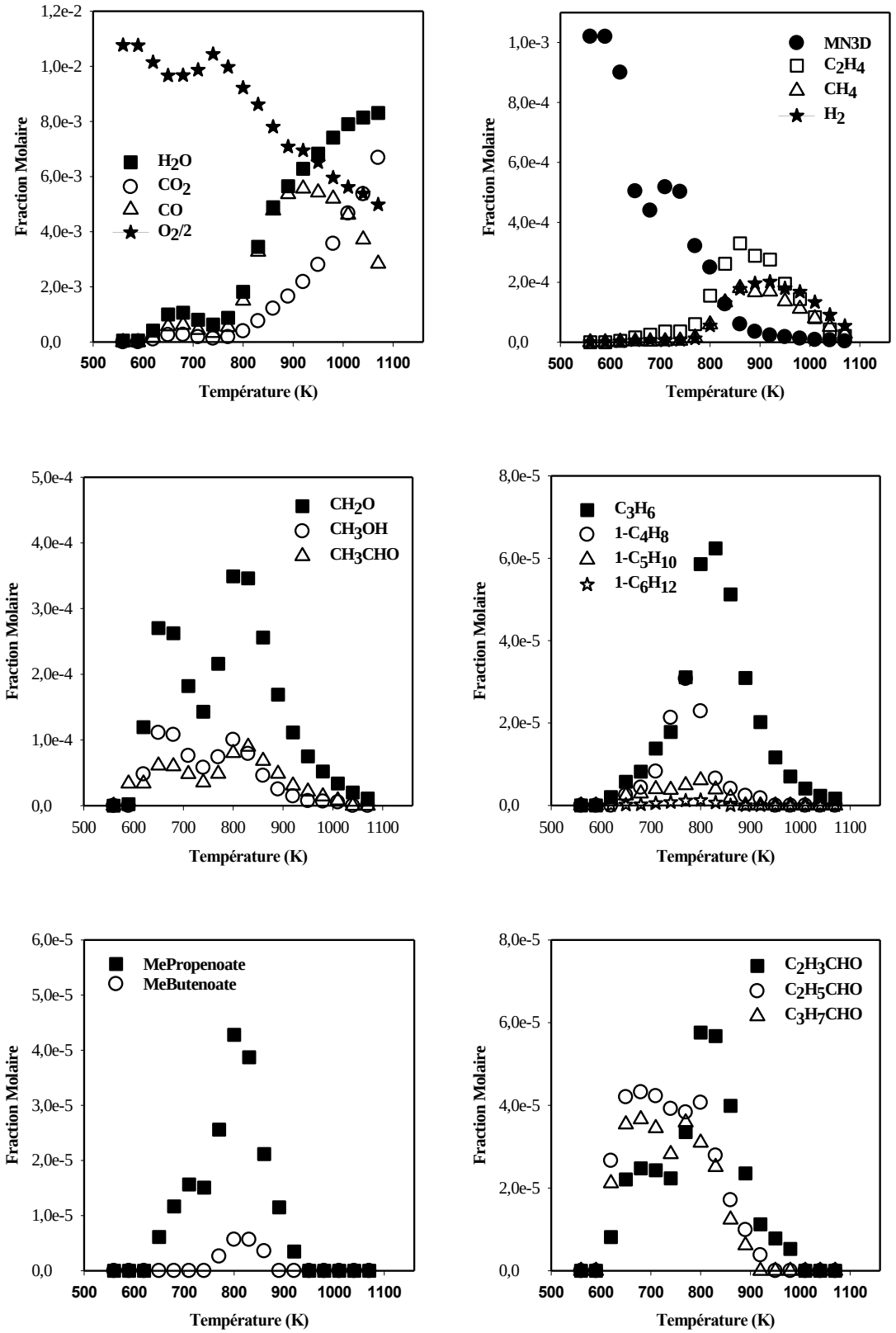


Figure V-61 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

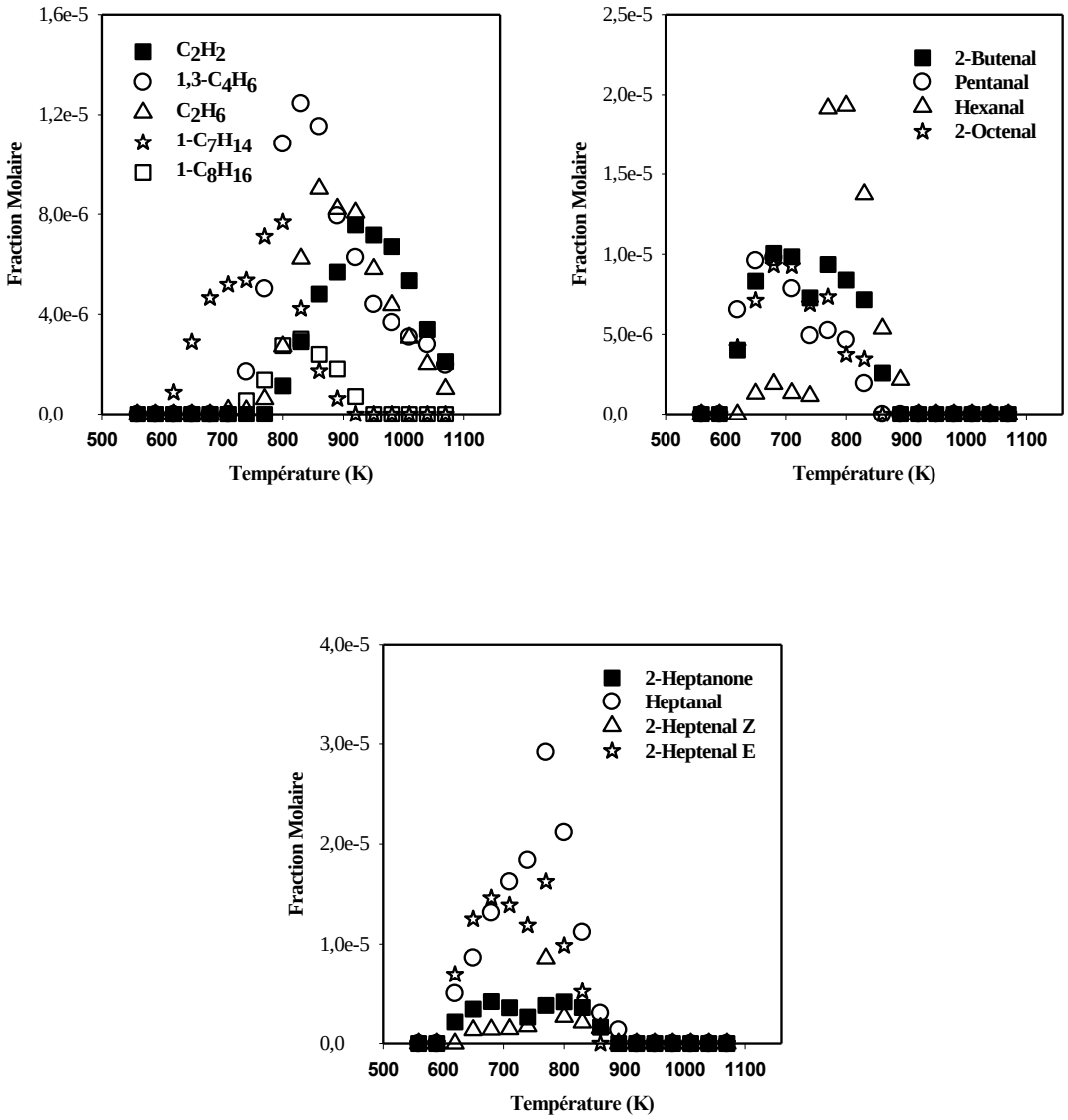


Figure V-61 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=0,6 ; τ=0,7s

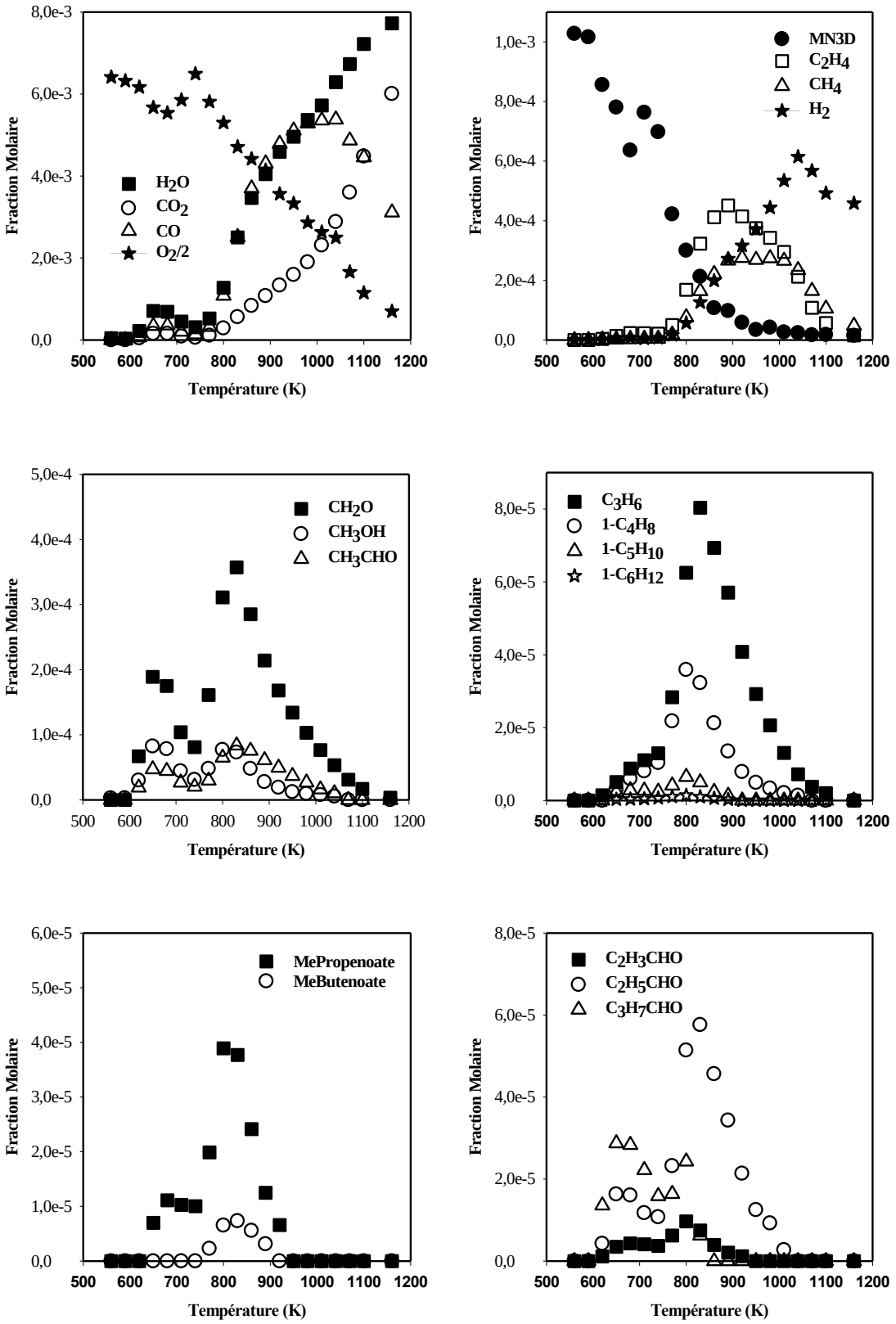


Figure V-62 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

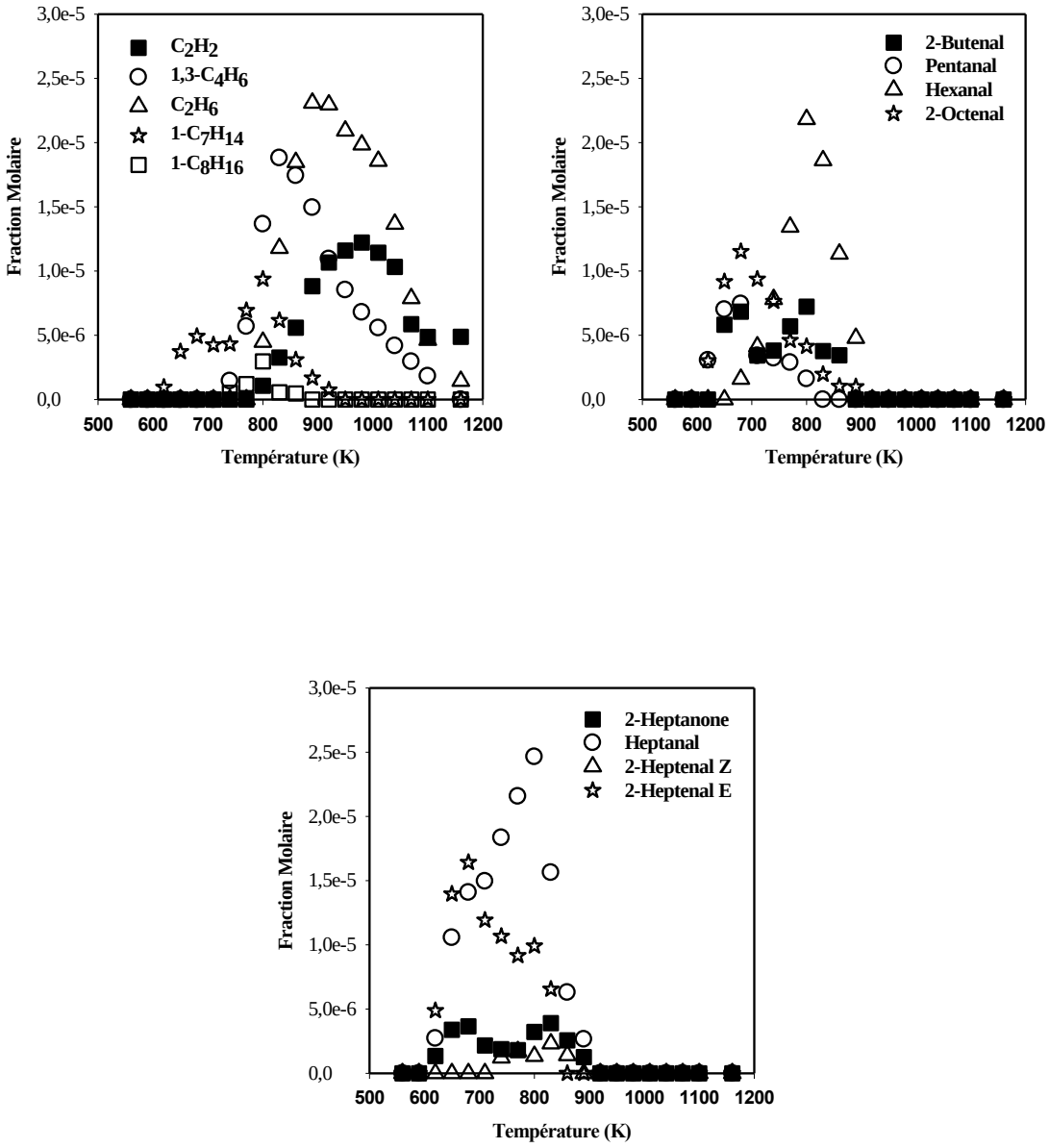


Figure V-62 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=1 ; τ=0,7s

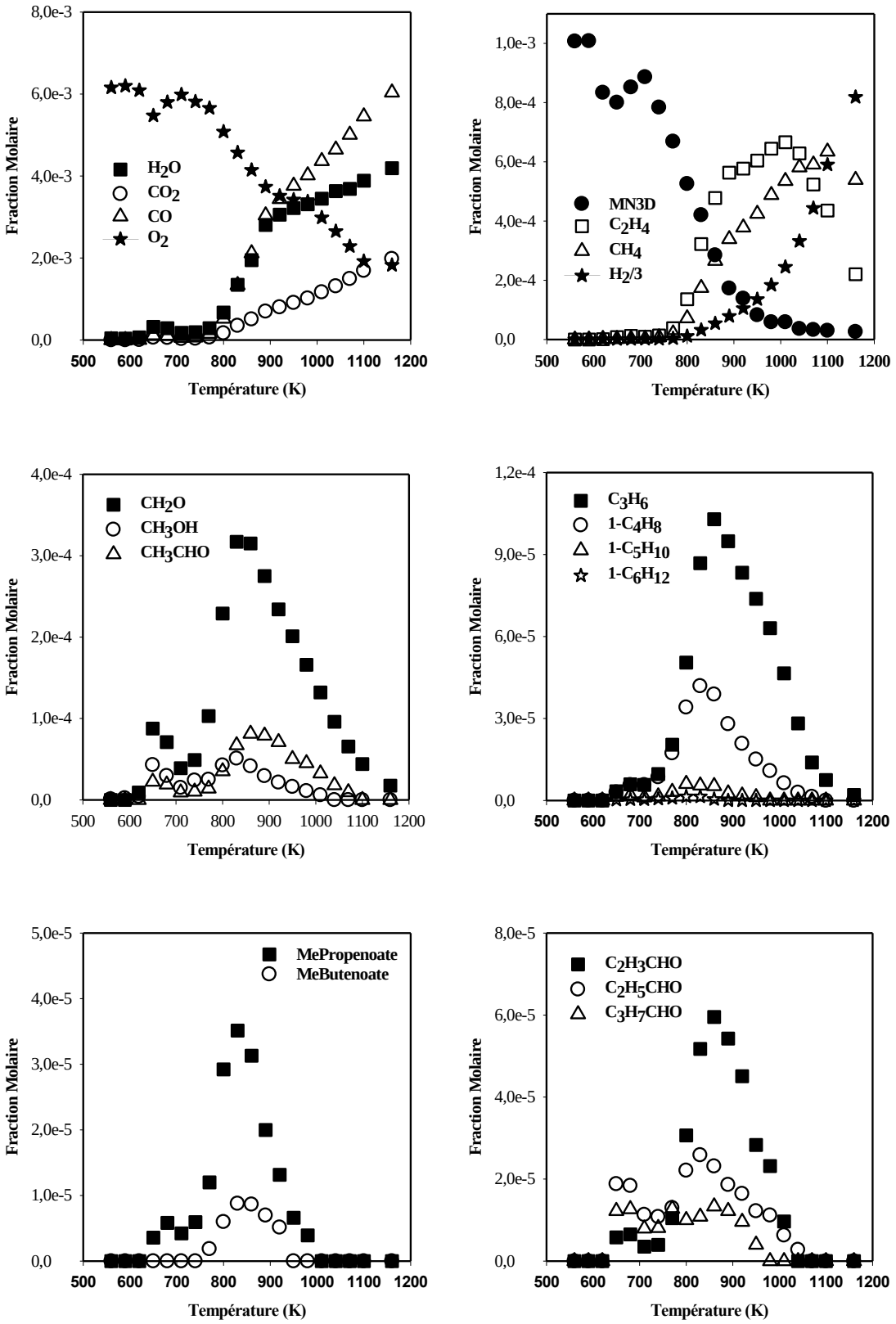


Figure V-63 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7s

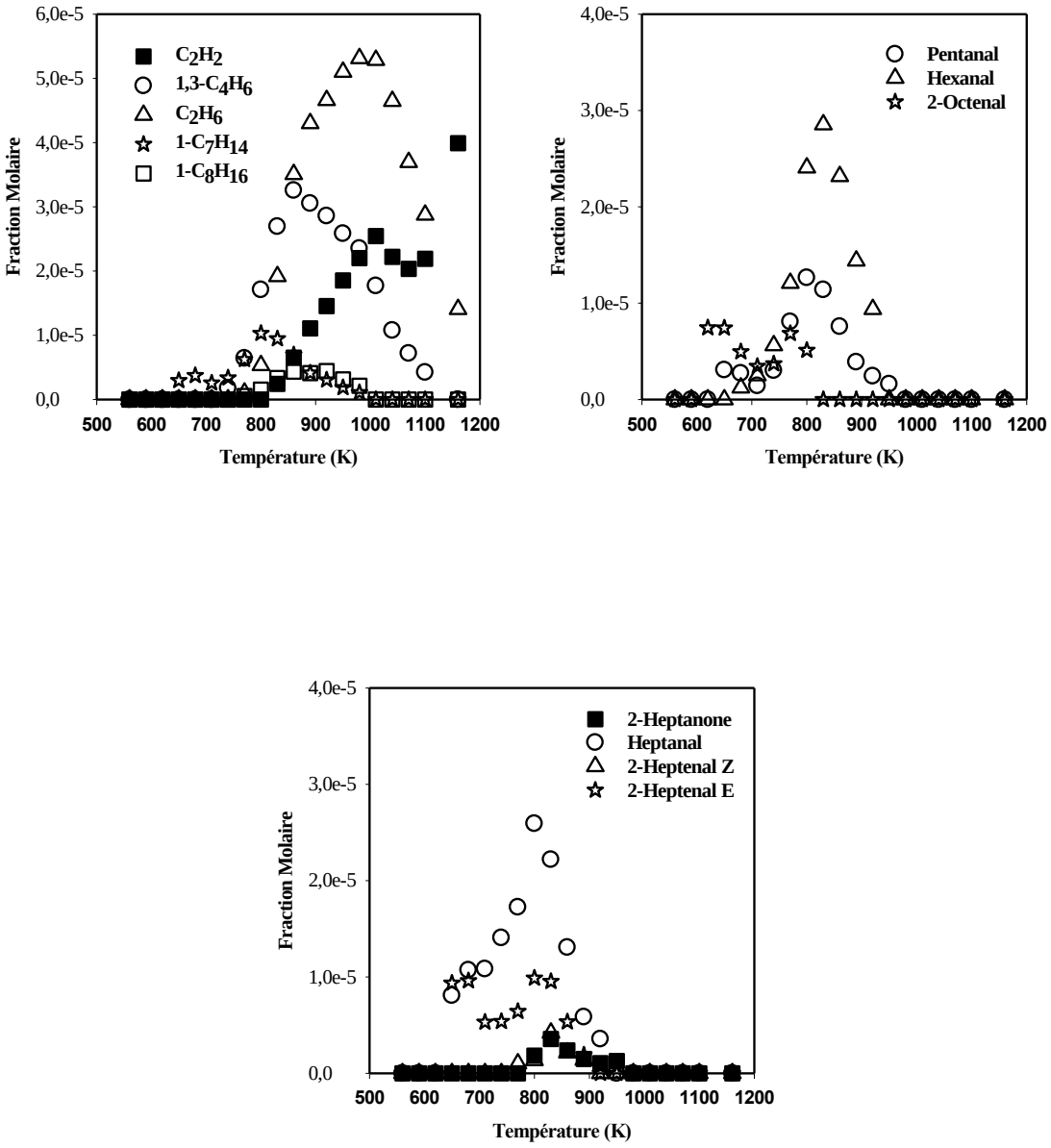


Figure V-63 : Oxydation du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité : X_{MN2D}=0,1% ; P=10 atm ; φ=2 ; τ=0,7s

c) Comparaison des résultats expérimentaux de cette étude et ceux de la littérature

Zhang *et al* [5] ont effectué des travaux sur l'oxydation de 4 esters méthyliques en C_9 dont le non-2-énoate de méthyle et le non-3-énoate de méthyle en moteur CFR. Les résultats obtenus sont concordants avec nos résultats expérimentaux concernant l'identification des produits d'oxydation : les produits de fin de combustion (CO, CO_2, H_2O), les hydrocarbures non oxygénés (CH_4, C_2H_6, C_2H_4, C_3H_6, 1-alcènes) et les composés oxygénés (aldéhydes, cétones, esters méthyliques insaturés de petites tailles). Ces auteurs ont également observé, une baisse de réactivité de ces esters méthyliques insaturés, ce que confirme notre étude.

Conclusion sur l'oxydation des esters à chaîne alkyle insaturée

Dans cette deuxième partie du chapitre, nous avons présenté des résultats sur l'oxydation des esters insaturés obtenus en réacteur auto_agité par jets gazeux dans les mêmes conditions d'étude que celles des esters saturés. Diverses espèces (réactifs, intermédiaires stables, produits) ont été identifiées et quantifiées.

Les rsultats expérimentaux ont montré que les esters insaturés sont moins réactifs que les esters saturés à basse température. Ce résultat s'explique comme suit : d'une part, les radicaux formés lors de l'arrachement d'un atome d'hydrogène (métathèse) peuvent être stabilisés par effet mésomère du fait de la présence de la double liaison et d'autre part, la rigidité de ces doubles liaison réduit les possibilités de formation des cycles à 6 ou 7 membres lors de l'oxydation de l'ester.

3. Comparaison des oxydations d'esters méthyliques saturés et insaturés

Nous avons étudié l'oxydation d'esters méthyliques à chaîne alkyle saturée et insaturée. L'ensemble des résultats expérimentaux obtenus pour ces composés nous permet de comparer la réactivité des produits entre eux à travers la vitesse d'oxydation de chaque hydrocarbure étudié. Ces travaux fournissent de précieuses informations sur l'influence de la double liaison sur l'oxydation des esters.

3.1 Détermination de la vitesse d'oxydation d'un composé

Les expériences ont été réalisées dans un réacteur ouvert parfaitement agité. Dans un réacteur idéal, l'un des principes qui régit son bon fonctionnement est la conservation de matière. L'équation qui traduit ainsi cette conservation de matière pour une espèce k s'écrit :

$$F_{E,k} + \iiint R_k dV = F_{S,k} + \frac{dn_k}{dt} \qquad \text{Equation V-1}$$

Où

$F_{E,k}$: Débit molaire entrant de l'espèce k

R_k : Débit de production chimique (si négatif : consommation et si positif : production)

$F_{S,k}$: Débit molaire de sortie de l'espèce k

$\frac{dn_k}{dt}$: Débit d'accumulation de l'espèce k dans le réacteur

Or dans un réacteur ouvert parfaitement agité, le débit d'accumulation est nul (travail en régime permanent). De plus, la pression P, la température T et la vitesse de production de l'espèce k R_k sont constantes et uniformes dans tout le réacteur. Par conséquent, l'équation V-1 donne :

$$R_k = \frac{F_{S,k} - F_{E,k}}{V_r} \qquad \text{Equation V-2}$$

En supposant que le mélange gazeux est parfait (PQ=FRT) et en définissant $F_k = X_k \times F_{total}$, l'équation V-2 s'écrit:

$$R_k = \frac{P}{RT}\left(\frac{X_{S,k}Q_S - X_{E,k}Q_E}{V_r}\right) \qquad \text{Equation V-3}$$

Les différentes expériences étant menées avec un fort taux de dilution, on peut considérer dès cet instant que le débit volumique total est constant. En posant $\tau = V_r / Q$, l'équation V-3 s'écrit finalement

$$R_k = \frac{P}{RT}\left(\frac{X_{S,k} - X_{E,k}}{\tau}\right) \qquad \text{Equation V-4}$$

Avec

R_k : Débit de production chimique (si R_k est négatif : consommation et si R_k est positif : production)

P : Pression

R : Constante des gaz parfaits

T : Température

$X_{E,k}$: Fraction molaire de l'espèce k en entrée

$X_{S,k}$: Fraction molaire de l'espèce k en sortie

τ : Temps de passage

3.2 Comparaison des vitesses d'oxydation des molécules

a) Influence de la double liaison

Dans cette partie, nous nous proposons d'étudier l'influence de la double liaison présente dans la chaîne alkyle sur l'oxydation des esters méthyliques. Pour ce faire, nous avons déterminé les vitesses d'oxydation de l'hexanoate de méthyle, de l'octanoate de méthyle, de l'oct-2-énoate de méthyle, du nonanoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle. Ensuite nous avons comparé les vitesses d'oxydation. Les profils des vitesses d'oxydation de ces différents esters méthyliques sont représentés sur les figures V-64 à V-67.

La figure V-64 présente une comparaison de vitesse d'oxydation de l'hexanoate de méthyle et

de l'hex-3-enoate de méthyle. Les deux vitesses sont très similaires.

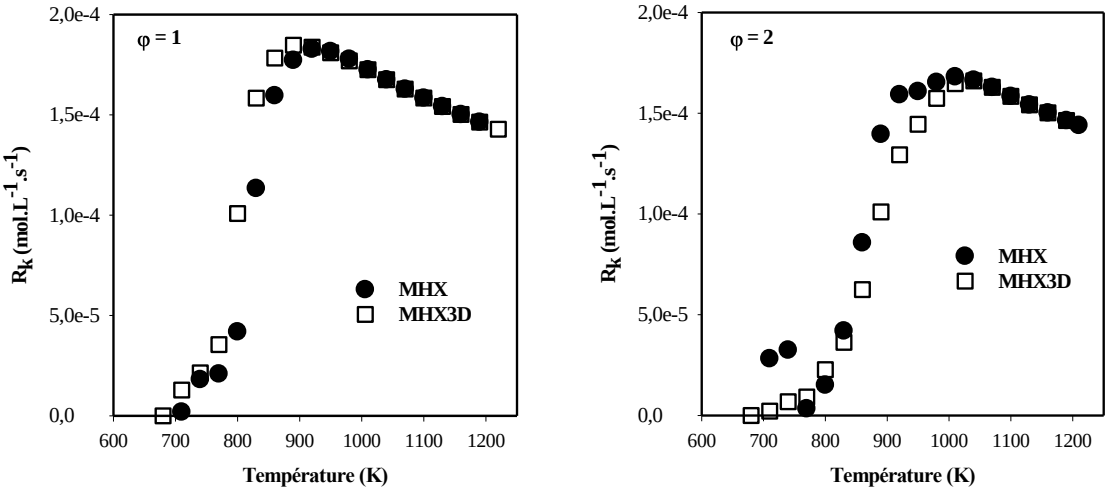


Figure V-64 : Comparaison de vitesses de consommation de l'hexanoate de méthyle et de l'hex-3-enoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7 s)

La figure V-65 présente une comparaison de la vitesse de consommation de l'octanoate de méthyle à celle de l'oct-2-énote de méthyle. On constate que l'influence de la double liaison est beaucoup plus marquée à basse température (560-770 K). Dans cette zone, la présence de la double liaison ralentit la consommation de l'oct-2-énoate de méthyle. Par contre au-delà de 770 K, les deux vitesses sont similaires.

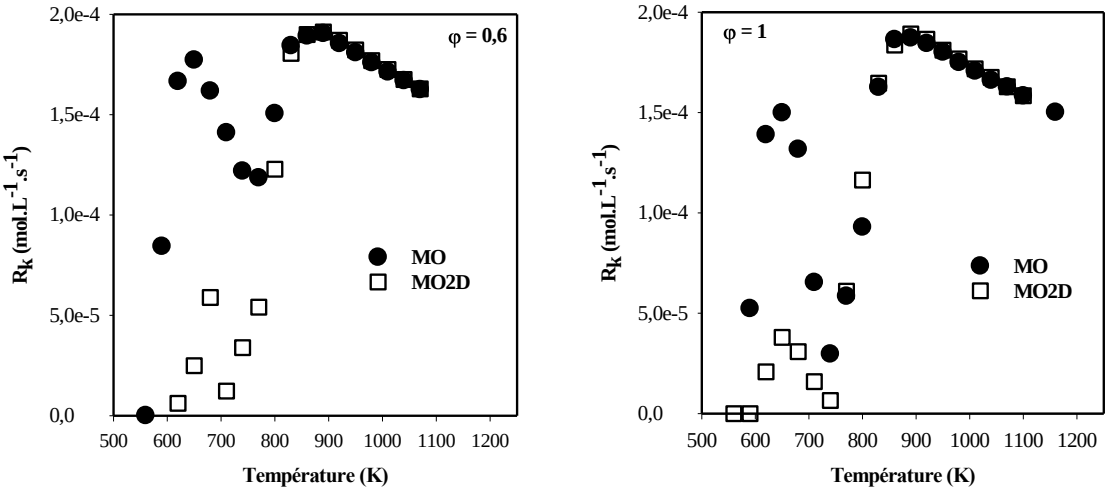


Figure V-65 : Comparaison des vitesses de consommation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7s)

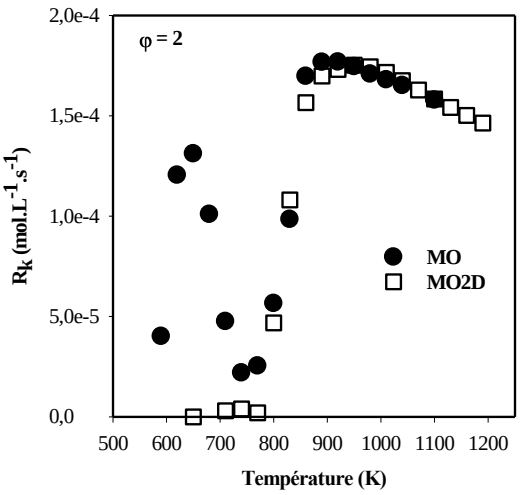


Figure V-65 : Comparaison des vitesses de consommation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7s)

La figure V-66 présente une comparaison de la vitesse de consommation du nonanoate de méthyle et du non-2-énoate de méthyle. Généralement, nous remarquons que le nonanoate de méthyle est plus réactif que le non-2-énoate de méthyle. Cette réactivité est encore plus accentuée dans le domaine de basse température.

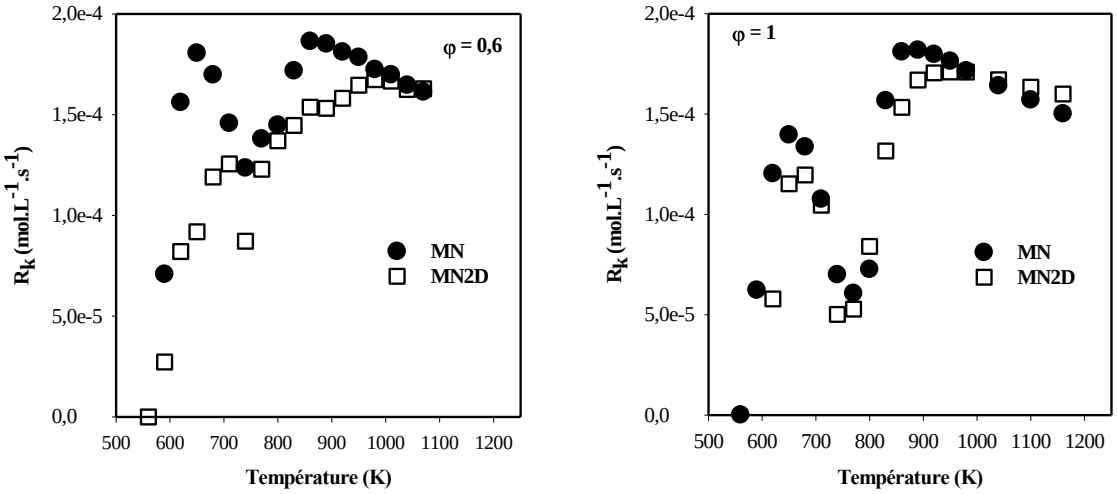


Figure V-66 : Comparaison des vitesses de consommation du nonanoate de méthyle et du non-2-énoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7s

La figure V-67 présente une comparaison de la vitesse du nonanoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle. Nous constatons que le nonanoate de méthyle est plus réactif que le non-3-enoate de méthyle pour les richesses 0,6 et 1. En milieu riche, les deux vitesses sont assez similaires.

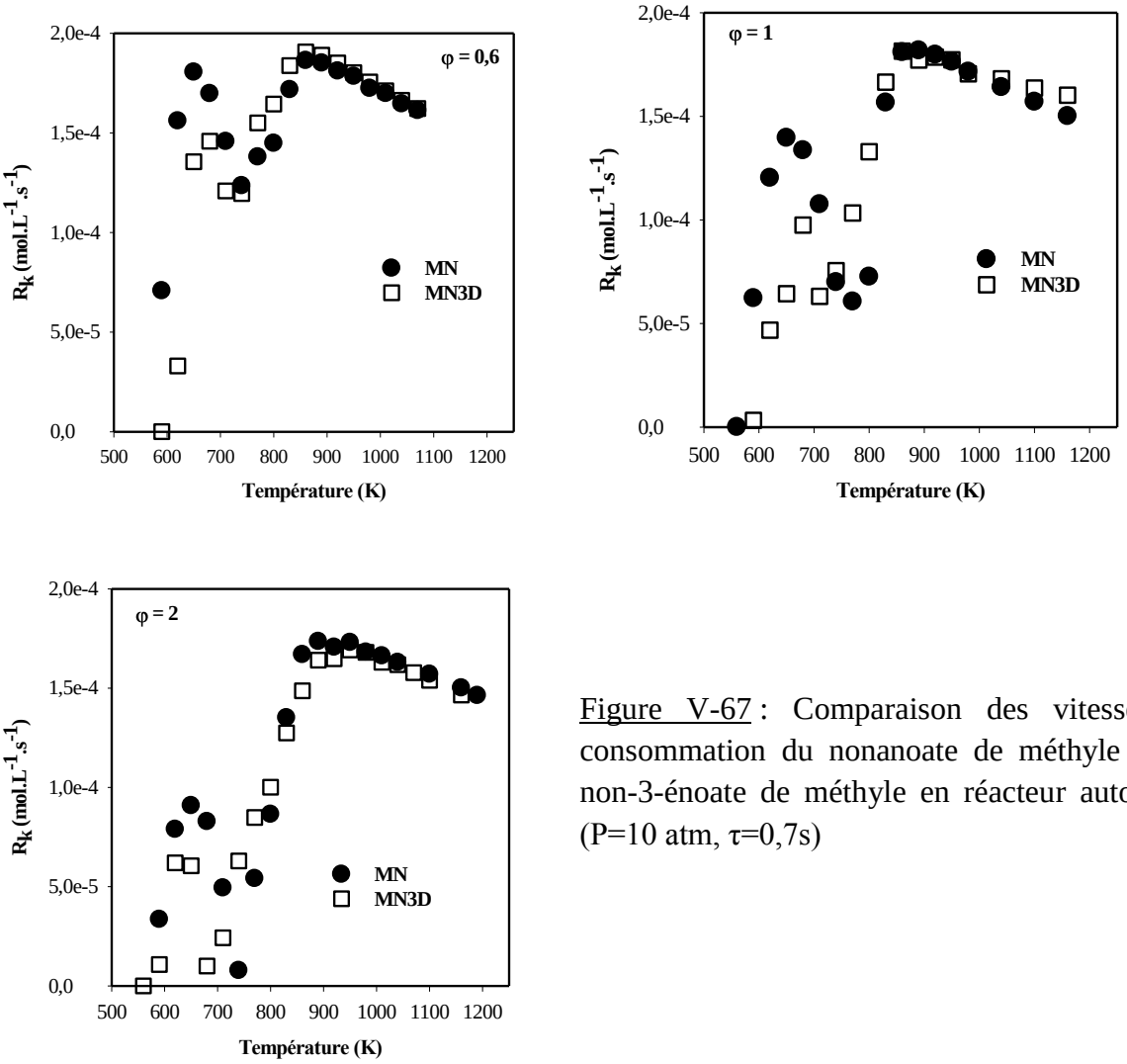


Figure V-67 : Comparaison des vitesses de consommation du nonanoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7s)

b) Influence de la position de la double liaison

La figure V-68 présente une comparaison de la vitesse d'oxydation du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle.

On remarque que le non-3-énoate de méthyle est légèrement moins réactif que le non-2-énoate de méthyle. Ce constat peut s'expliquer la diminution des possibilités de formation de cycles à 6 ou 7 membreslorsque l'insaturation se déplace vers les positions centrales de la chaîne allylique.

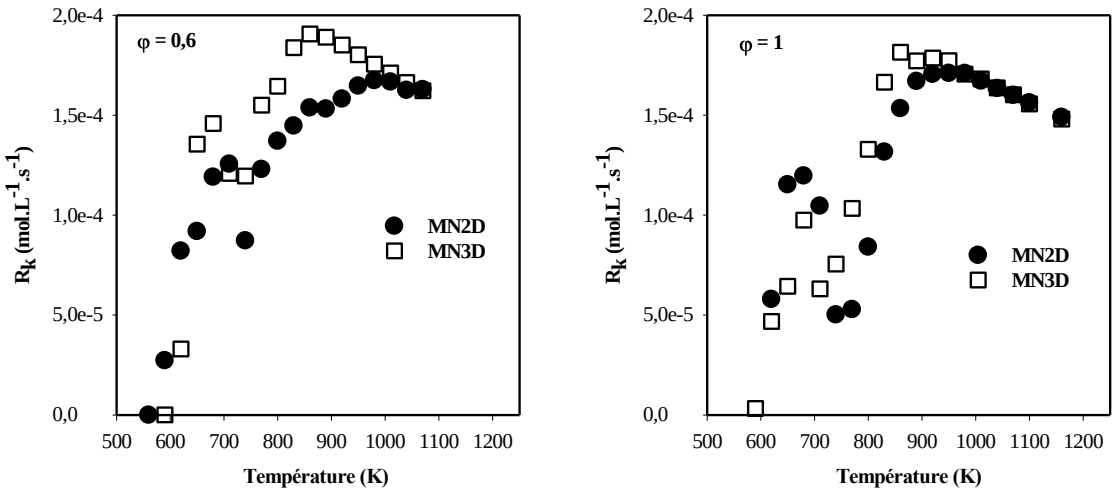


Figure V-68 : Comparaison des vitesses de consommation du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle en réacteur auto-agité (P=10 atm, τ=0,7s)

Ces comparaisons de vitesse d'oxydation nous ont permis de mettre en évidence l'effet inhibiteur de la double liaison sur la réactivité des esters, en particulier dans le domaine de basse température. Ceci pourrait être expliqué par la réaction préférentielle des porteurs de chaîne (H, OH, HO_2) avec l'ester insaturé pour former des radicaux qui réagissent ensuite difficilement, ce qui n'alimente pas le pool de radicaux et entraîne par conséquent une baisse de réactivité.

3.3 Comparaison des fractions molaires des produits formés

Les fractions molaires des produits d'oxydation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle d'une part, du nonanoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle d'autre part, sont comparées dans les figures qui suivent. Les produits communs sont les espèces oxygénées légères (CO, CO_2, formaldéhyde, acétaldéhyde), hydrocarbures (CH_4, C_2H_4, C_3H_6, 1-C_4H_8, 1-C_5H_{10}, 1-C_6H_{12}, etc.) et esters méthyliques insaturés (prop-2-énoate de méthyle, but-3-énoate de méthyle, pent-4-énoate de méthyle, etc.).

La comparaison a été faite pour toutes les richesses étudiées et nous avons constaté que les tendances sont les mêmes quelque soit la richesse. Ainsi, nous présenterons les résultats pour un mélange stoechiométrique.

- Hexanoate de méthyle et hex-3-énoate de méthyle

Sur la figure V-69 sont représentées les fractions molaires des oxydes de carbone formées par l'hexanoate de méthyle et l'hex-3-énoate de méthyle. On constate que les quantités formées de d'oxydes de carbone sont très similaires. Néanmoins, au-delà de 900 K, l'hexanoate de méthyle est légèrement plus réactif que l'hex-3-énoate de méthyle.

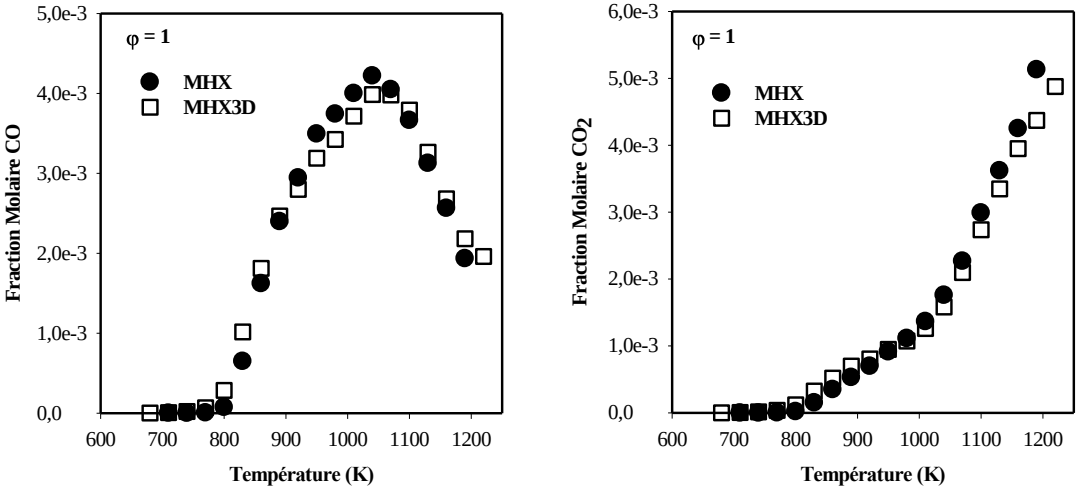
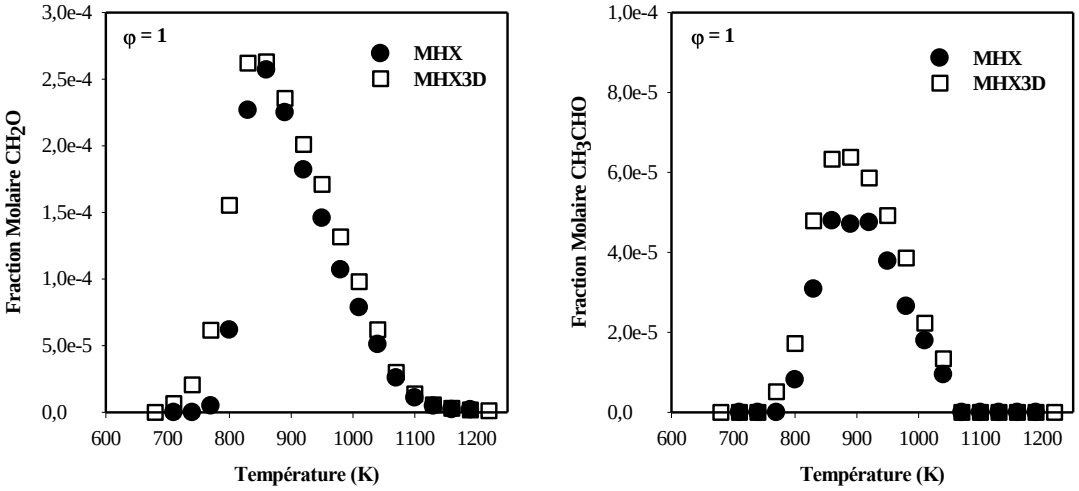


Figure V-69 : Comparaison des quantités d'oxydes de carbone formées lors de l'oxydation de l'hexanoate de méthyle et de l'hex-3-énoate de méthyle

Sur les figures V-70 (φ=1), on retrouve une comparaison des fractions molaires de quelques espèces communes à l'oxydation de l'hexanoate de méthyle et de l'hex-3-énoate de méthyle. On constate que les quantités de CH_2O formées sont très proches, mais légèrement plus élevées pour l'hex-3-enoate de méthyle. Les quantités d'acétaldéhyde sont un peu plus élevées également pour l'hex-3-enoate de méthyle. On constate également que les fractions molaires du méthane, d'éthane, d'acétylène et de buta-1,3-diène sont nettement supérieures pour l'hex-3-énoate de méthyle. Enfin l'éthylène, le propène, le but-1-ène et le pent-1-ène sont formés en plus grandes quantités par oxydation de l'hexanoate de méthyle.

Les valeurs plus élevées de CO et de C_2H_4 (deux produits qui renseignent sur la réactivité d'un combustible) formées à l'oxydation de l'hexanoate de méthyle nous amènent à dire que cet ester est légèrement plus réactif que l'hex-3-énoate de méthyle.



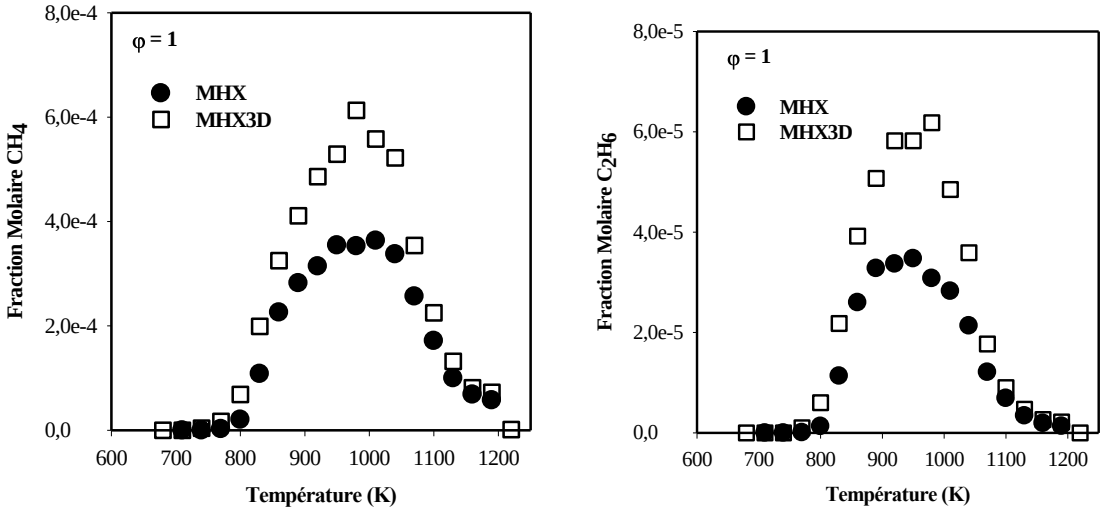
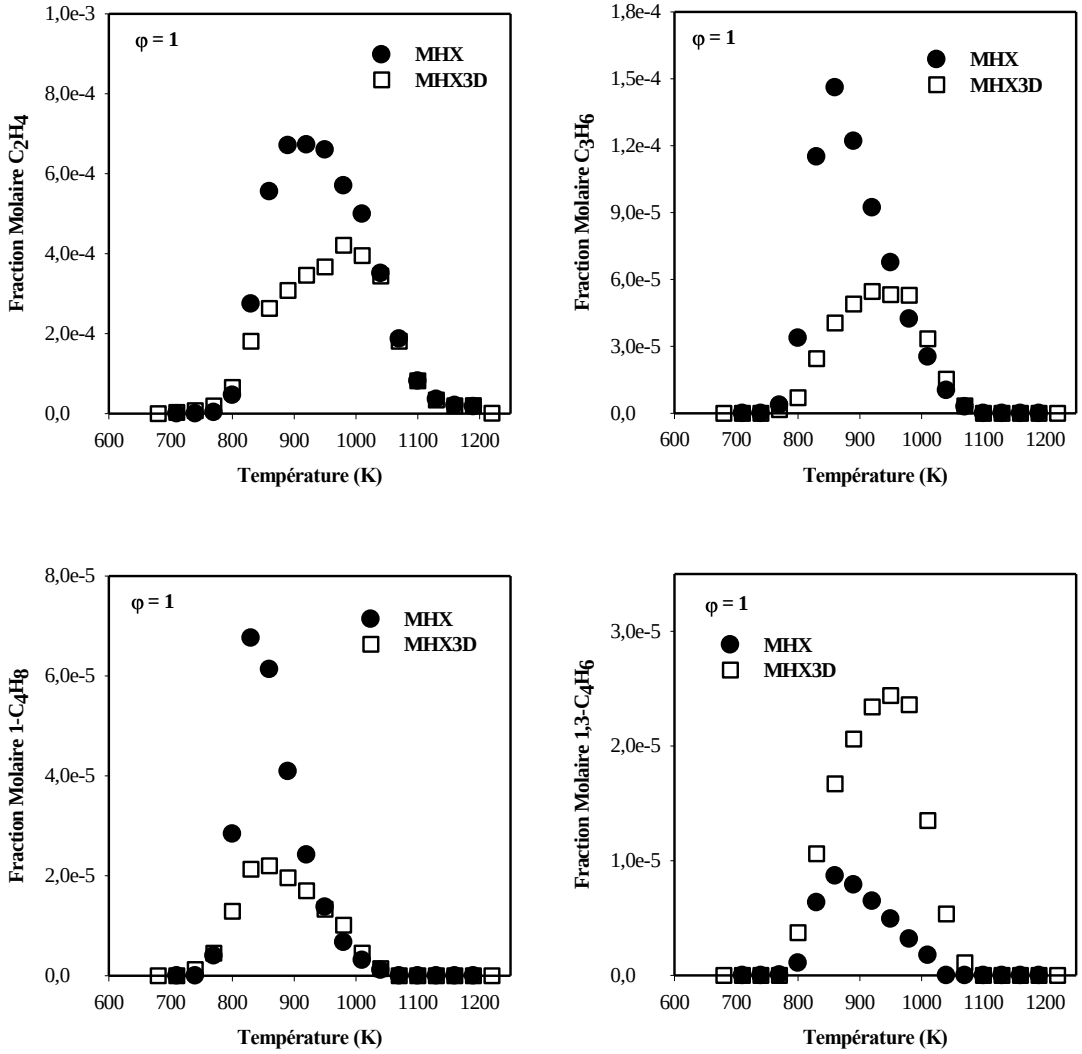


Figure V-70 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'hexanoate de méthyle et de l'hex-3-énoate de méthyle à φ=1



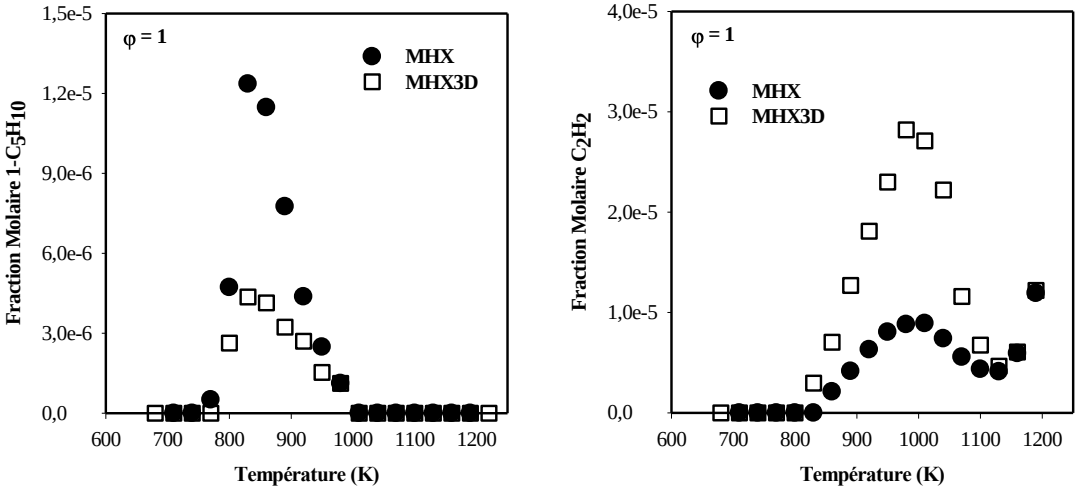


Figure V-70 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'hexanoate de méthyle et de l'hex-3-énoate de méthyle à φ=1

➢ Octanoate de méthyle et oct-2-enoate de méthyle

Nous avons comparé les quantités d'oxydes de carbone formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle. Les résultats sont indiqués sur la figure V-71. Les quantités de CO sont très proches entre 750 et 950 K. En-deçà de 750 K, elles sont plus élevées pour l'octanoate de méthyle et au-delà de 950 K, les quantités de CO formées par l'oct-2-énoate de méthyle sont légèrement plus élevées. Le dioxyde de carbone, quant à lui, est formé en quantités égales par les deux composés.

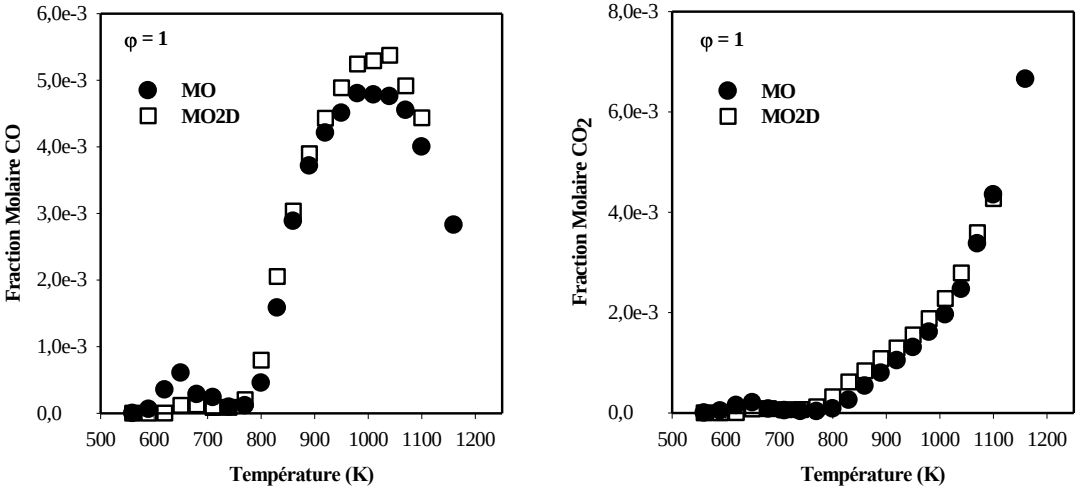
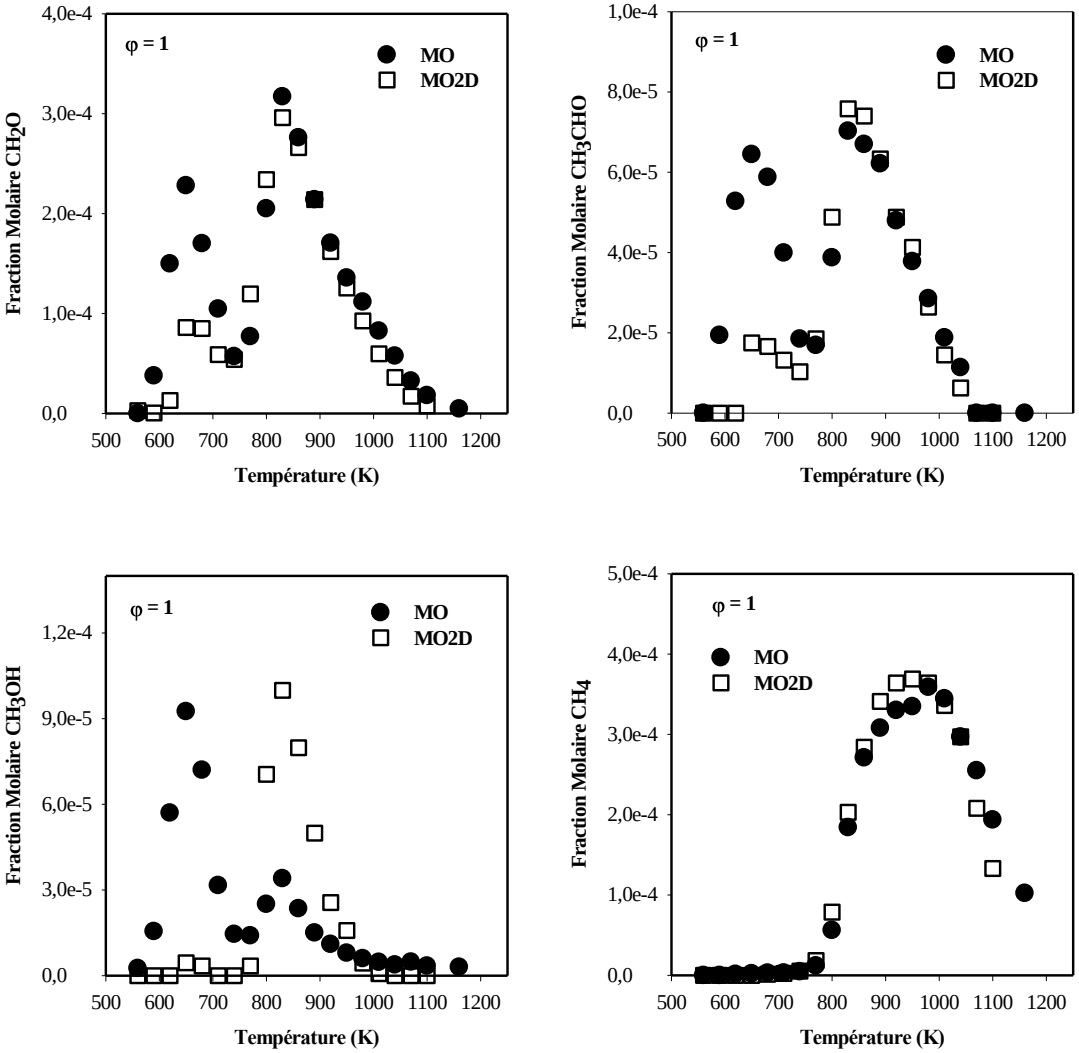


Figure V-71 : Comparaison des quantités d'oxydes de carbone formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle

Sur la figure V-72 est comparée des quantités de quelques espèces communes à l'oxydation de l'octanoate et de l'oct-2-énoate de méthyles pour la richesse 1. On constate que les quantités de CH_2O et CH_3CHO sont plus élevées pour l'octanoate de méthyle à basse température alors que les quantités sont très proches à haute température. La fraction molaire maximale de méthanol est atteinte dans la zone de basse température à 650 K pour l'octanoate de méthyle, tandis qu'elle est atteinte à haute température (ca. 850 K) pour l'oct-2-énoate de méthyle. Les quantités d'éthylène sont plus importantes pour l'octanoate de méthyle. On peut également noter une importante formation d'acétylène pour l'oct-2-énoate de méthyle par rapport à celle de l'octanoate de méthyle.



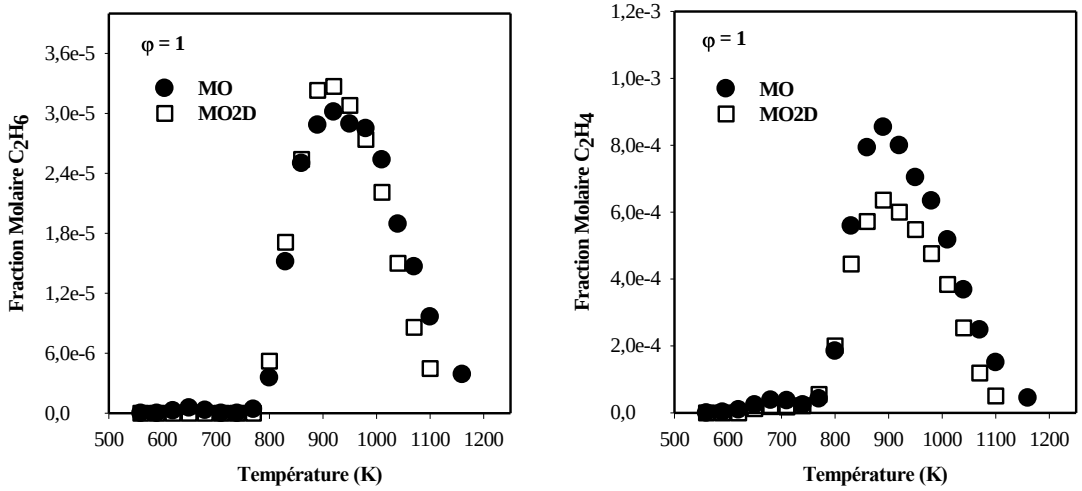
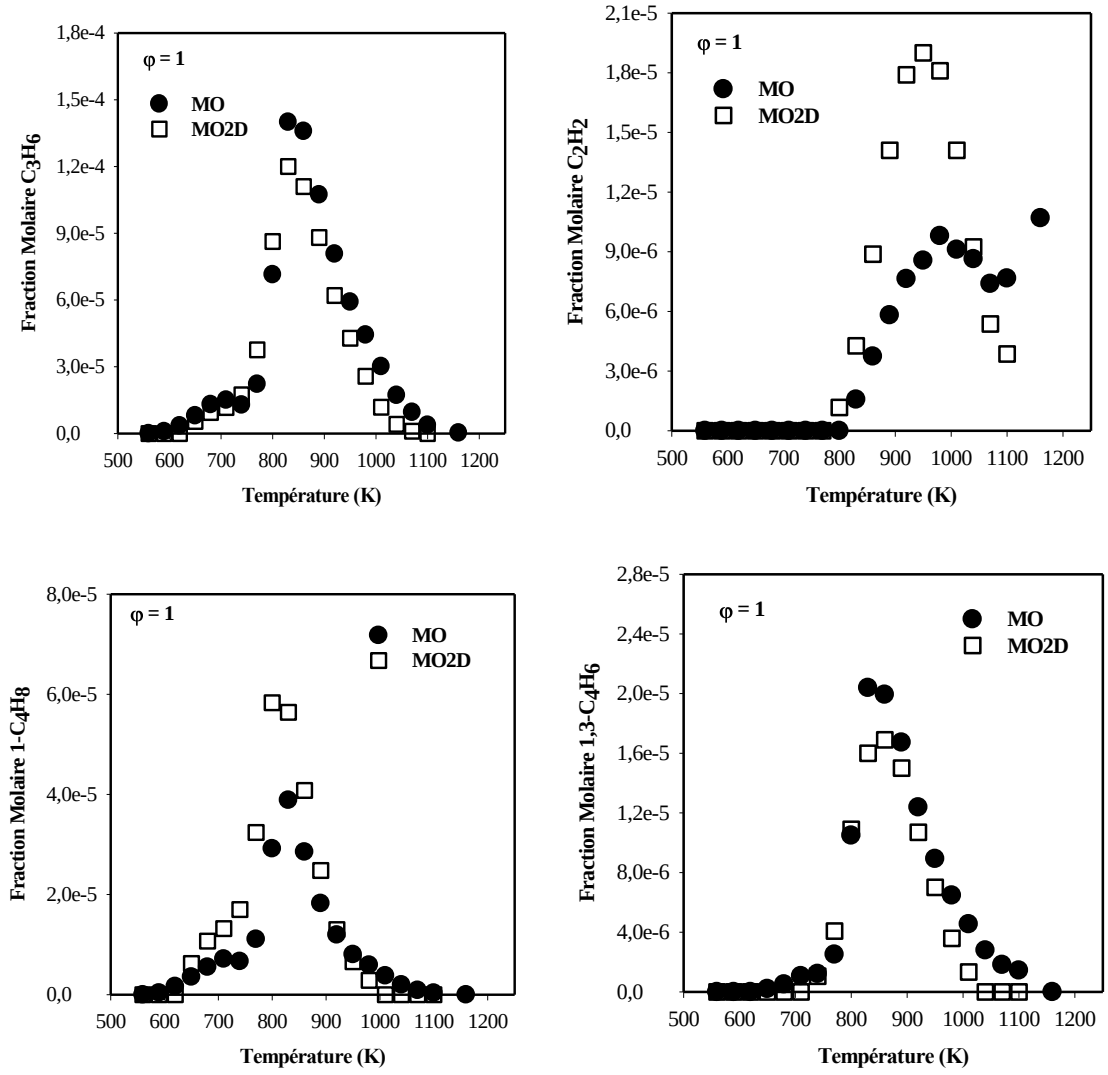


Figure V-72 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle à φ=1



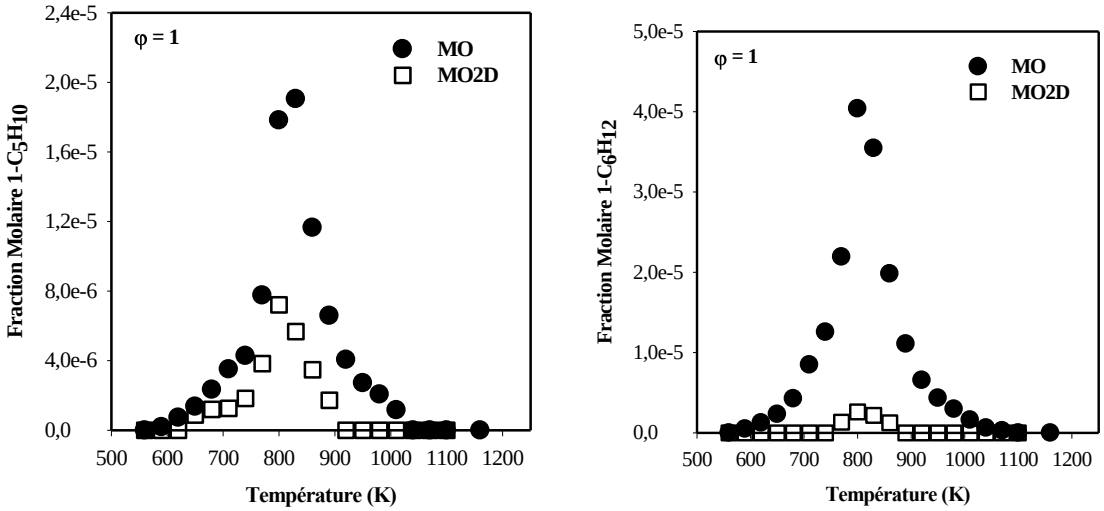


Figure V-73 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et de l'oct-2-énoate de méthyle à φ=1

- Nonanoate de méthyle, Non-2-énoate de méthyle et Non-3-énoate de méthyle

La figure V-74 présente la comparaison des quantités d'oxydes de carbone formés lors de l'oxydation du nonanoate, du non-2-énoate et du non-3-énoate de méthyle. Les fractions molaires des oxydes de carbone formés sont quasi-identiques, à l'exception de la zone de flamme froide (500-770 K). Dans ce domaine de température, les quantités de CO formées par oxydation du nonanoate de méthyle sont plus importantes que celles issues de l'oxydation des deux autres carburants.

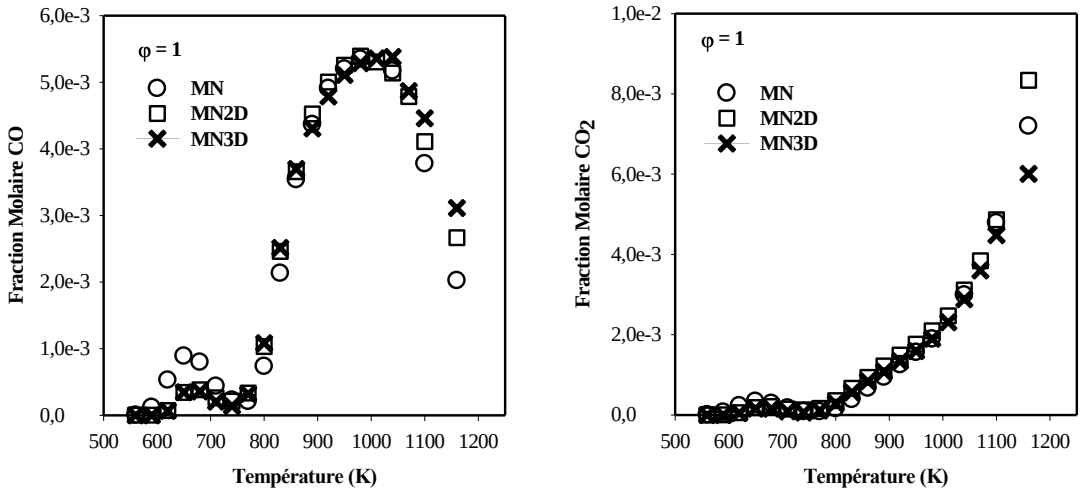
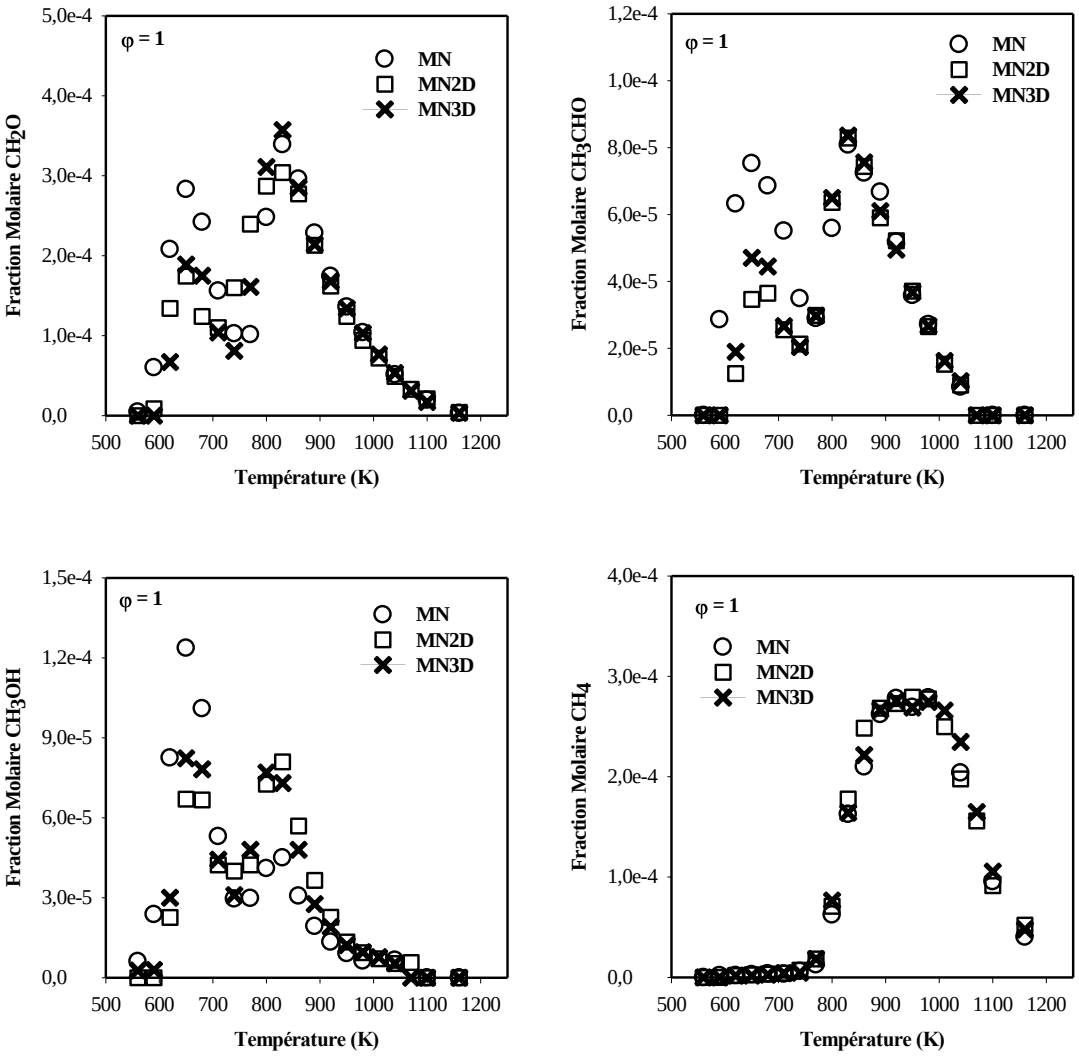


Figure V-74 : Comparaison des quantités d'oxydes de carbone formées lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle

La figure V-75 présente une comparaison des quantités de quelques espèces communes aux

trois composés pour les richesses 1. On peut remarquer que les quantités du formaldéhyde sont très proches à haute température (>750 K), tandis qu'à basse température les valeurs différent légèrement. Les quantités d'acétaldéhyde issu de l'oxydation du nonanoate de méthyle sont plus élevées à basse température que celles du non-3-enoate et du non-2-enoate de méthyles, mais les valeurs restent très proches à haute température. Le méthanol, quant à lui, est formé avec des quantités plus élevées pour le nonanoate de méthyle à basse température alors qu'à haute température il est formé en faible quantité par rapport à celles des non-2-énoate et non-3-énoate de méthyle. Les fractions molaires de l'éthylène et du propène sont plus élevées dans le cas de l'oxydation du nonanoate de méthyle ; elles sont, par contre plus faibles pour l'acétylène. Les quantités respectives de méthane et d'éthane restent proches quelle que soit la nature de l'ester pour chaque richesse.



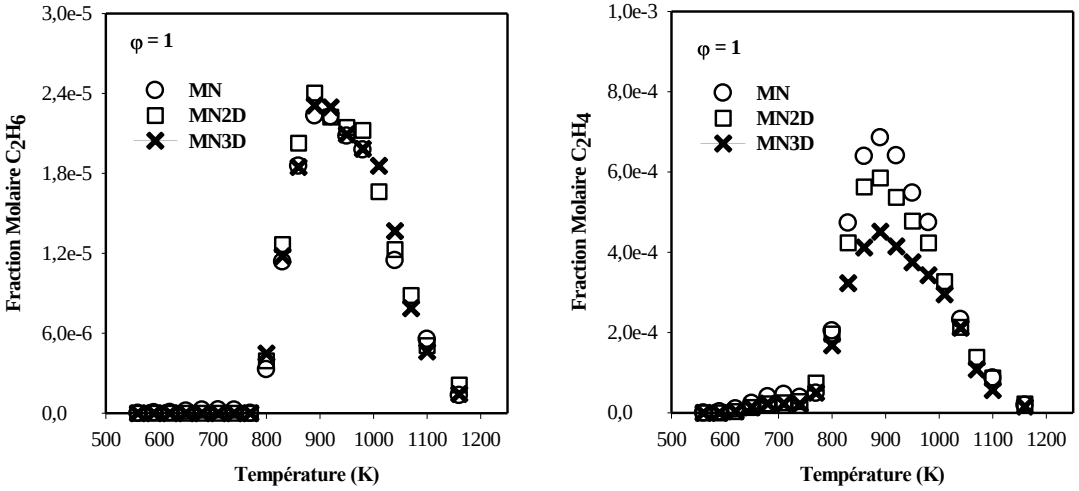
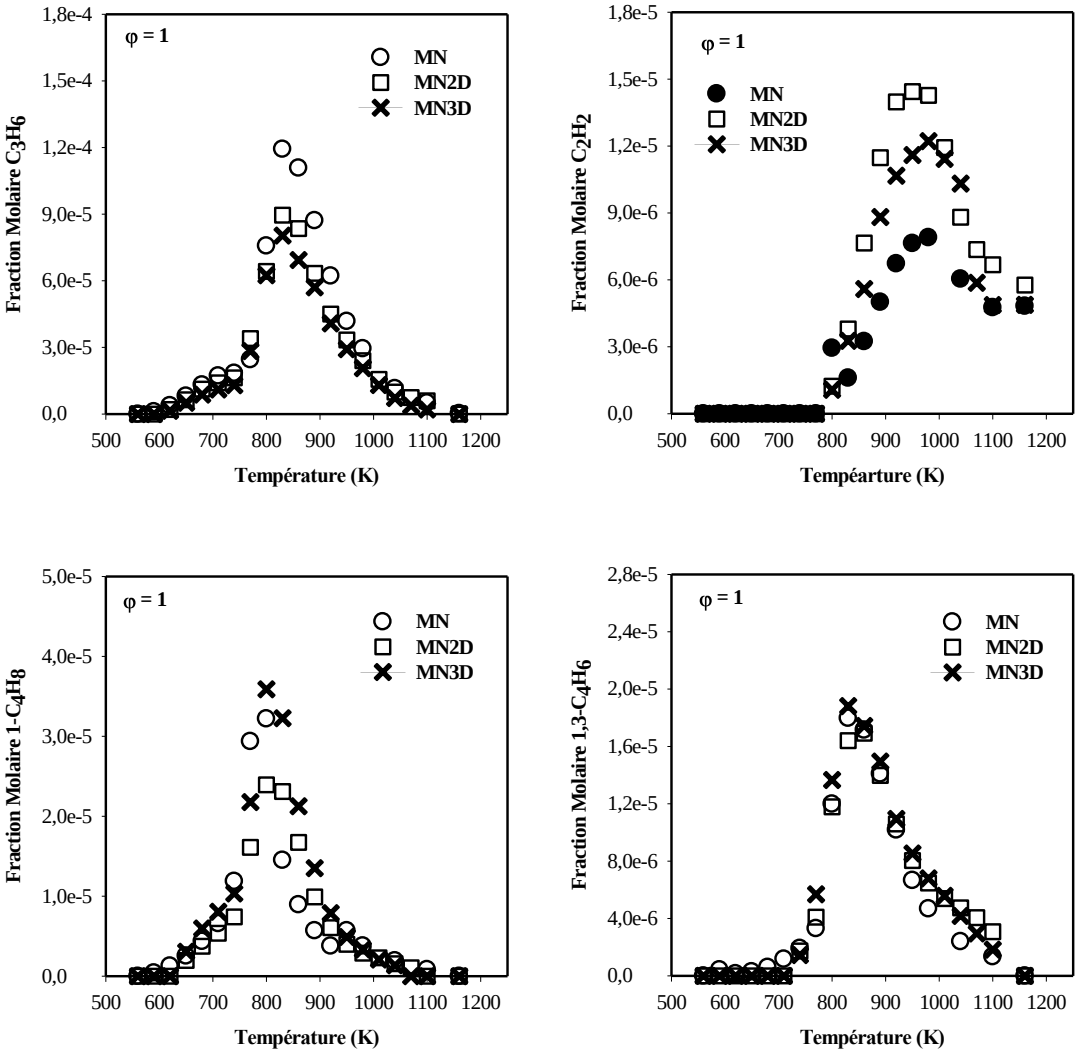


Figure V-75 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle à φ=1



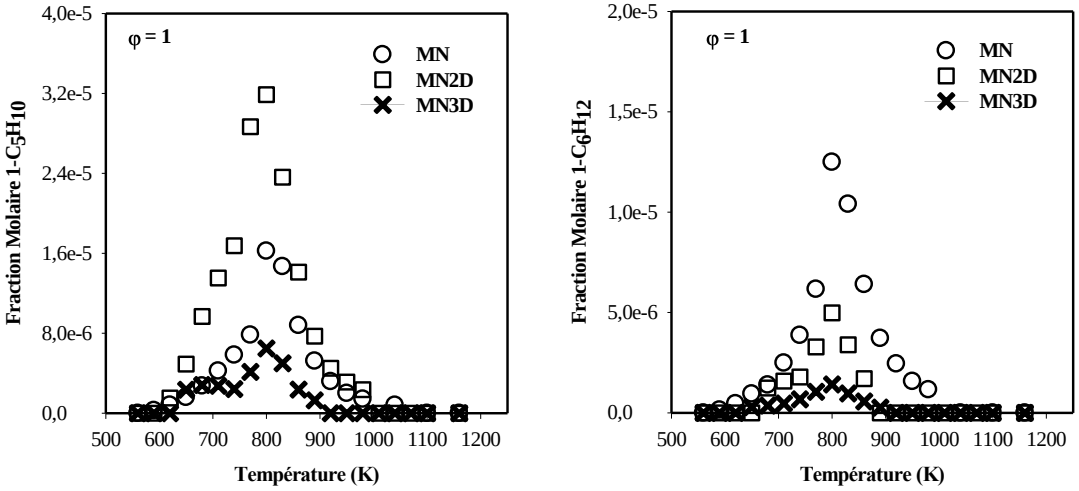


Figure V-75 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle, du non-2-énoate de méthyle et du non-3-énoate de méthyle à φ=1

4. Comparaison de l'oxydation des esters et des alcanes

La combustion des alcanes linéaires et des esters méthyliques à longue chaîne est considérée par plusieurs auteurs comme étant très proche aussi bien en terme de réactivité qu'au niveau des émissions ([8] [9] [10] [11]). A l'issue de cette étude sur l'oxydation des esters méthyliques, il nous a semblé intéressant de faire une étude comparative de l'oxydation des esters méthyliques et des n-alcanes correspondants. Nous avons ainsi comparé les fractions molaires normalisées, d'une part, de l'octanoate de méthyle et du n-octane et d'autre part du nonanoate de méthyle et du n-nonane. Cette comparaison est complétée par celle de quelques espèces communes à l'oxydation des deux familles de composés étudiés. Le choix de ces hydrocarbures a été basé sur le facteur stoechiométrique (nommé Z) qui renseigne sur la quantité d'oxygène nécessaire à l'oxydation. En effet, l'octanoate de méthyle et le n-octane d'une part, le nonanoate de méthyle et le n-nonane d'autre part, présentent respectivement le même facteur stoechiométrique. Par ailleurs, nous ne présenterons que les résultats pour φ=1 ; les tendances étant les mêmes pour toutes les richesses étudiées.

4.1 Comparaison de la réactivité

La figure 76 présente une comparaison des fractions molaires de l'octanoate de méthyle et du n-octane d'une part, et du nonanoate de méthyle et du n-nonane d'autre part pour la richesse égale à 1. Dans cette condition, il apparaît que l'octanoate de méthyle et le n-octane, le nonanoate de méthyle et le n-nonane, présentent respectivement des profils similaires : une rapide consommation des hydrocarbures entre 560 et 650 K qui ralentit ensuite jusqu'à 750 K avant de redémarrer définitivement.

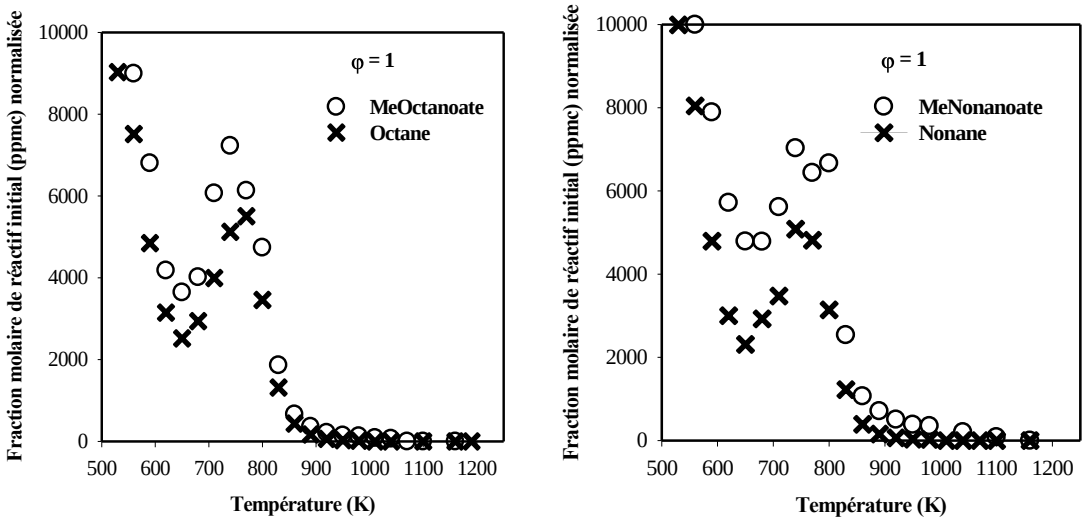


Figure V-76 : Comparaison des fractions molaires normalisées de l'octanoate de méthyle et du n-octane, du nonanoate de méthyle et du n-nonane en réacteur auto-agité

4.2 Comparaison des fractions molaires de quelques espèces formées

Les fractions molaires mesurées des produits d'oxydation de l'octanoate de méthyle et du n-octane d'une part (cf. figure V-77), du nonanoate de méthyle et du n-nonane d'autre part (cf. figure 78), sont comparées dans les figures qui suivent. Les produits communs sont les espèces oxygénées (monoxyde de carbone, dioxyde de carbone, formaldéhyde, acétaldéhyde) et les hydrocarbures (méthane, éthylène, propène, but-1-ène, buta-1,3-diène). Il apparaît que les fractions molaires, dans les deux cas, sont très similaires.

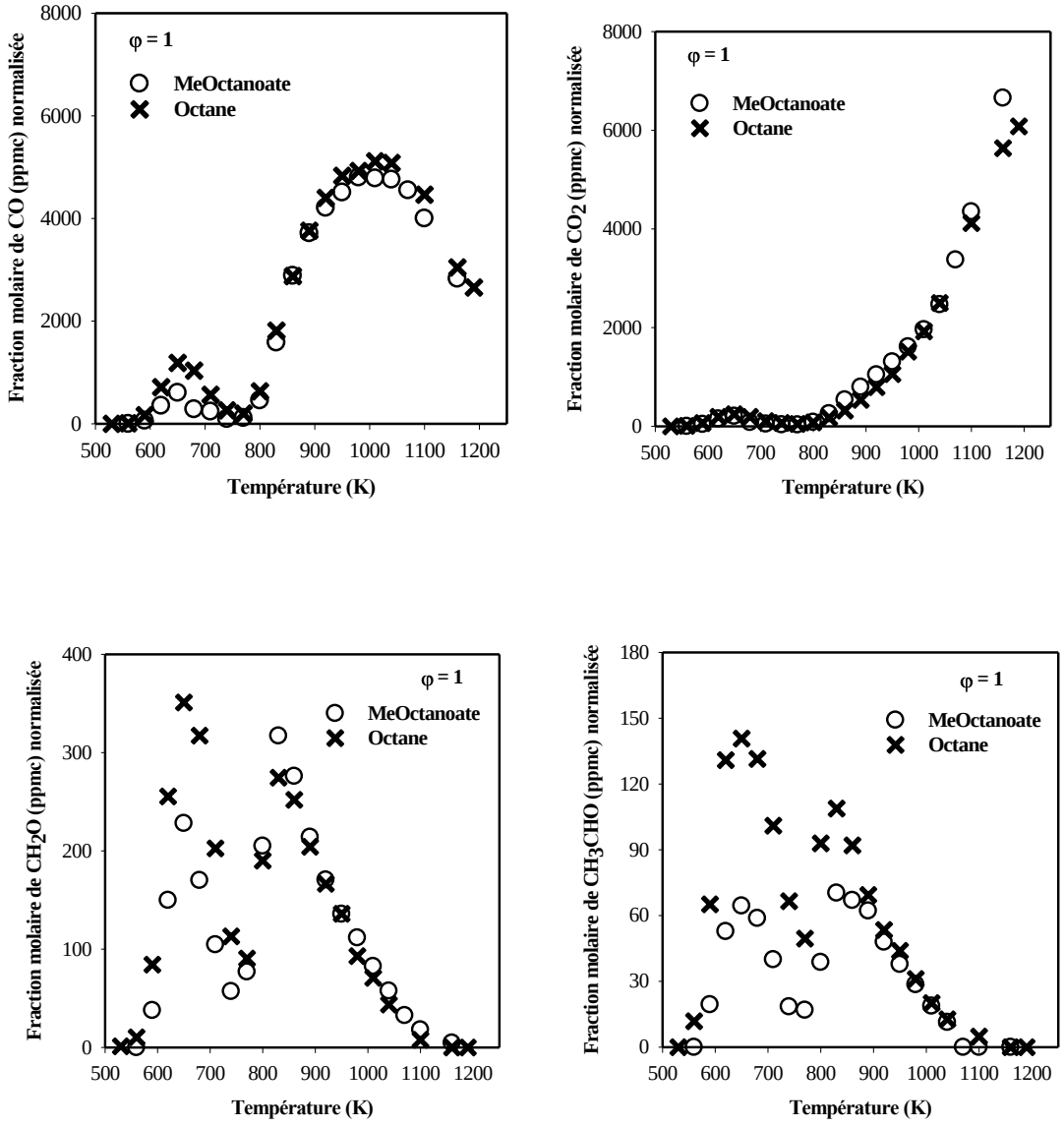


Figure V-77 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et du n-octane φ=1

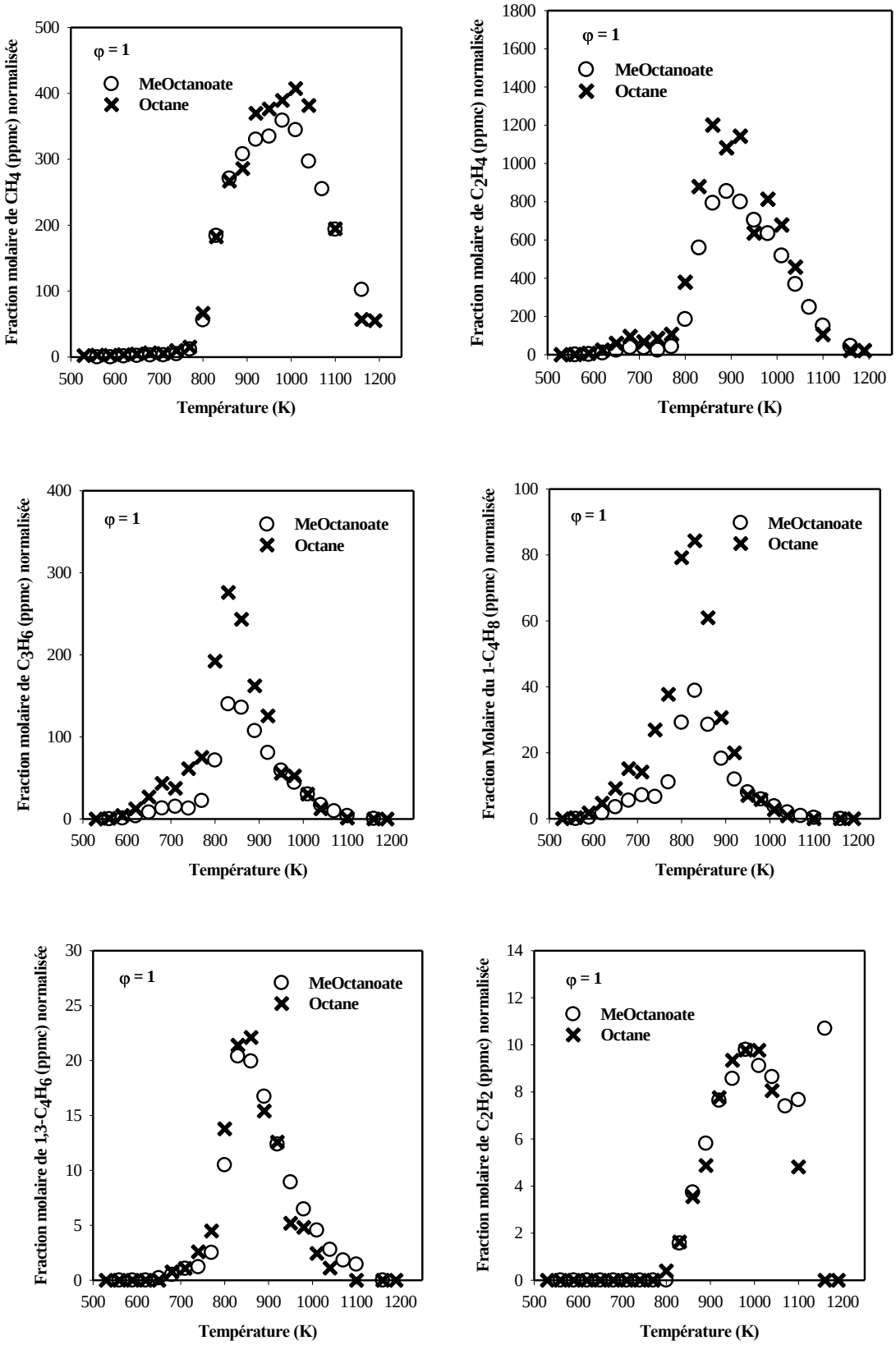


Figure V-77 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation de l'octanoate de méthyle et du n-octane φ=1

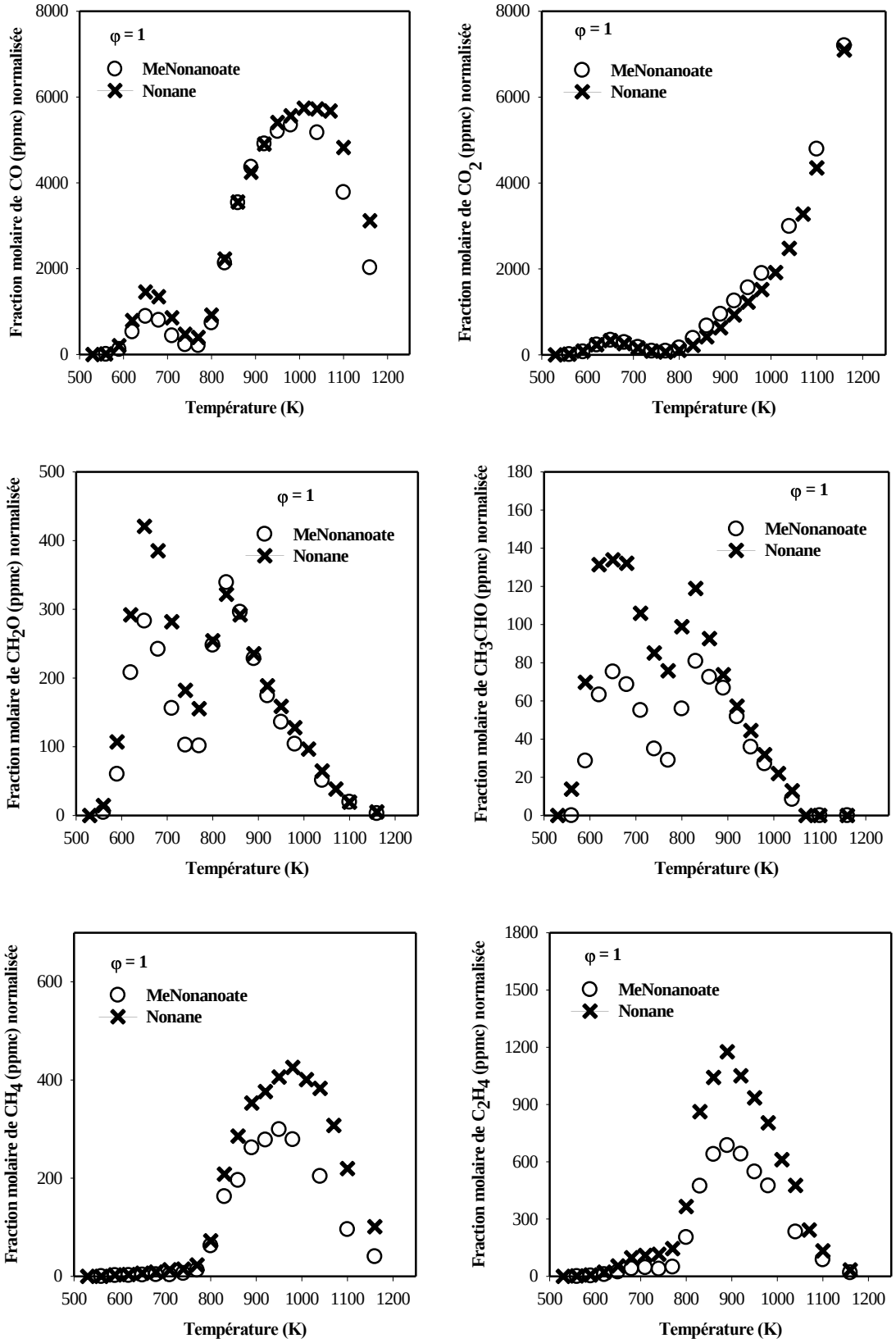


Figure V-78 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation du nonanoate de méthyle et du n-nonane φ=1

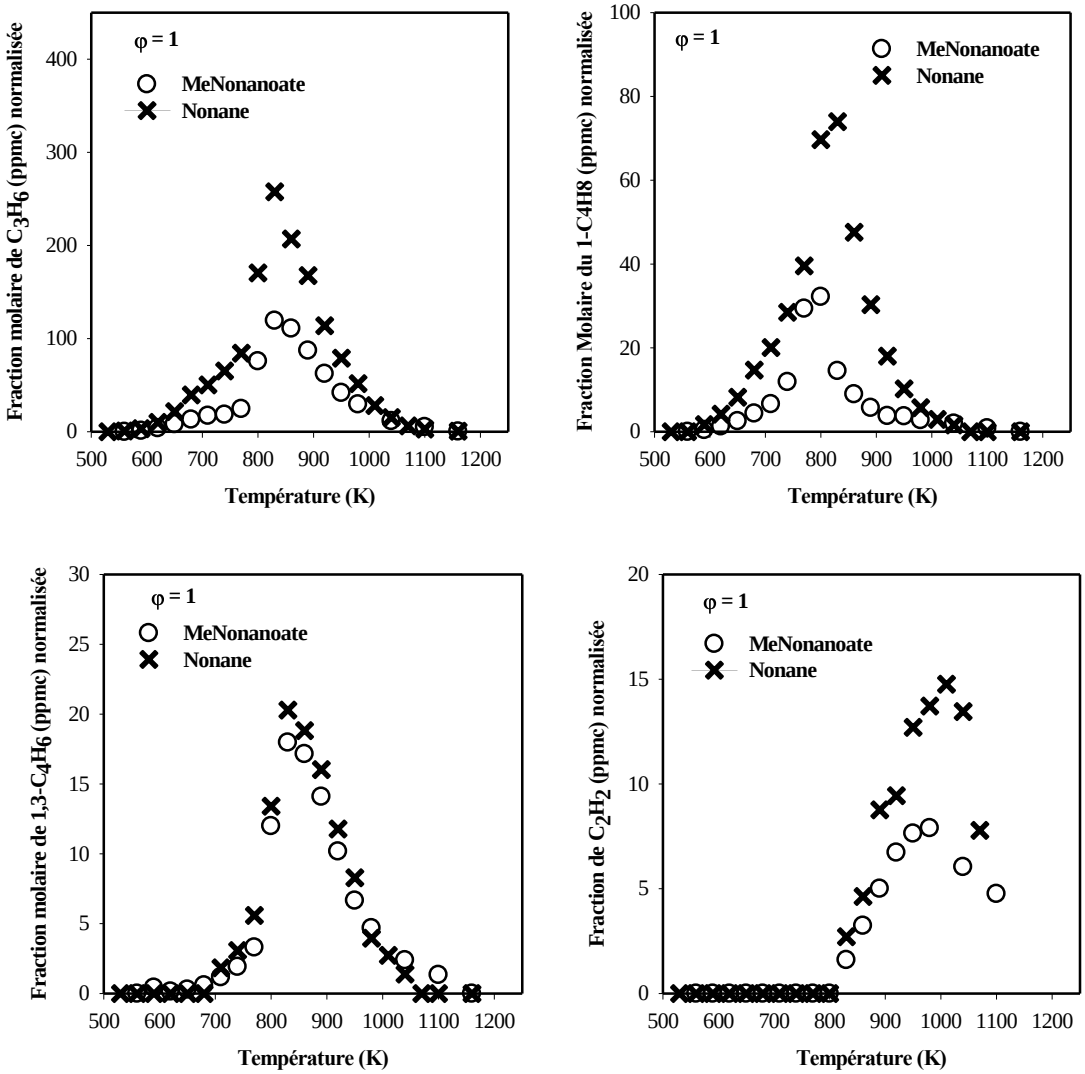


Figure V-78 : Comparaison des quantités de quelques espèces communes formées lors de l'oxydation du nonaanoate de méthyle et du n-nonane φ=1

Conclusion

L'étude de l'oxydation des esters méthyliques à chaîne alkyle saturée (du butanoate de méthyle au décanoate de méthyle) a permis d'obtenir de nouvelles données expérimentales qui ont servi à la validation du mécanisme cinétique proposé dans ce travail.

L'étude de l'oxydation des esters méthyliques mono-unsaturés a permis également d'obtenir de nouvelles données expérimentales qui serviront à valider un modèle cinétique, qui malheureusement n'a pas pu être proposé dans cette étude par manque de temps. Cependant, ces données ont permis de comparer les réactivités des esters méthyliques à chaîne alkyle saturée à celles des esters méthyliques mono-unsaturés. Cette comparaison a montré que la réactivité des esters méthyliques à chaîne alkyle saturée est supérieure à celle des esters méthyliques mono-unsaturés à basse température (T<800 K). En revanche, dans la zone de haute température (T>800 K), les réactivités sont similaires. Par ailleurs, la comparaison des résultats a révélé que la réactivité des molécules dépend également de la position de l'insaturation sur la chaîne alkyle.

Enfin, une comparaison des résultats obtenus pour l'oxydation des esters méthyliques et pour celle des alcanes, avec la même quantité de carbone initiale, a montré que les alcanes et les esters ont une réactivité très similaire. En revanche, les quantités produites de formaldéhyde, d'acétaldéhyde, de méthane, d'éthylène, de propène et d'acétylène lors de l'oxydation des esters sont moins élevées que celles obtenues pour l'oxydation des alcanes.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. Gail, S., et al.,

   A wide-ranging kinetic modeling study of methyl butanoate combustion. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(1): p. 305-311.

2. W. K. Metcalfe, C. Togbé, P. Dagaut, H. J. Curran and J. M. Simmie

   A jet-stirred reactor and kinetic modeling study of ethyl propanoate oxidation. Combustion and Flame, 2009. **156**(1): p. 250-260.

3. W. K. Metcalfe, S. Gail, S. A. Syed, M. J. Thomson and P. Dagaut

   Experimental and modeling study of C5H10O2 ethyl and methyl esters. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111** (19): p. 4001-4014.

4. M. H. Hakka, H. Bennadji, J. Biet, B. Sirjean, V. Warth, L. Coniglio, O. Herbinet, P.-A. Glaude, F. Billaud and F. Battin-Leclerc

   Oxidation of methyl and ethyl butanoates. International Journal of Chemical Kinetics. **42**(4): p. 226-252.

5. Y. Zhang, Y. Yang and A.L. Boehman,

   Premixed ignition behavior of C9 fatty acid esters: A motored engine study. Combustion and Flame, 2009. **156**(6): p. 1202-1213.

6. Y. Zhang and A.L. Boehman

   Experimental study of the autoignition of C8H16O2 ethyl and methyl esters in a motored engine. Combustion and Flame. **157**(3): p. 546-555.

7. G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

   Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. Energy & Fuels, 2008. **22**(3): p. 1469-1479.

8. H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook

   A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation. Combustion and Flame, 1998. **114**(1-2): p. 149-177.

9. E. M. Fisher, W. J. Pitz, H. J. Curran and C. K. Westbrook

   Detailed chemical kinetic mechanisms for combustion of oxygenated fuels. Proceedings of the Combustion Institute, 2000. **28**: p. 1579-1586.

10. 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. **31** (2): p. 2955-2961.

11. F. Battin-Leclerc

Detailed chemical kinetic models for the low-temperature combustion of hydrocarbons with application to gasoline and diesel fuel surrogates. Progress in Energy and Combustion Science, 2008. **34** (4): p. 440-498.

VI

Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation des alcools

Sommaire

VI. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation des alcools 213

1. Etude de l'oxydation des alcools purs 213

1.1. Oxydation du méthanol 213

1.2. Oxydation de l'éthanol 216

1.3. Oxydation du butan-1-ol 222

1.4. Oxydation du pentan-1-ol 247

1.1. Oxydation du hexan-1-ol 255

2. Oxydation de quelques mélanges alcools-hydrocarbures 263

2.1. Oxydation du mélange méthanol/essence 263

2.2. Oxydation des mélanges éthanol/surrogate d'essence (E85) 271

2.3. Oxydation des mélanges éthanol/n-heptane 278

2.4. Oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85) 285

2.5. Oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 292

VI. Etude expérimentale et validation de modèles cinétiques d'oxydation des alcools

Dans ce chapitre, nous avons étudié en réacteur auto-agité l'oxydation des alcools du méthanol (C_1) à l'hexanol (C_6). Cette étude a été réalisée à haute pression (10 atm) dans un large domaine de température et de richesse. Le temps de passage des gaz dans le réacteur a été fixé à 0,7s. L'ensemble des résultats obtenus (profils de concentration en fonction de la température des réactifs, produits et principaux intermédiaires) a ensuite été utilisé pour développer et valider un modèle cinétique détaillé capable de reproduire le comportement des alcools étudiés.

En plus des alcools purs, nous avons étudié également l'oxydation de quelques mélanges alcools/hydrocarbures afin de mettre en évidence les interactions pouvant exister entre les mécanismes d'oxydation de ces combustibles.

1. Etude de l'oxydation des alcools purs

1.1. Oxydation du méthanol

a) Conditions expérimentales

Nous avons débuté l'étude expérimentale des alcools avec le méthanol (CH_3OH). Le méthanol est un intermédiaire important dans le processus d'oxydation des hydrocarbures. Il a été envisagé comme carburant alternatif pour les nombreux avantages (faible formation de CO, NOx, de suies) qui découleraient de son oxydation. Par ailleurs, avec ces indices d'octane élevés (indice d'octane recherche :123-126 et indice d'octane moteur :96-103) [1, 2], le méthanol représente une alternative très intéressante au pétrole [3-5]. Ainsi, l'oxydation du méthanol a été l'objet de nombreuses études [6-8].

L'expérience sur l'oxydation du méthanol en réacteur auto-agité a été réalisée pour une seule richesse (φ=1) à 10 atm. Le tableau VI-1 récapitule les conditions d'étude de l'oxydation du méthanol en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{méthanol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$4{,}0.10^{-3}$	$6{,}00.10^{-3}$	$9{,}900.10^{-1}$	1	770-1130

Tableau VI-1 : Oxydation du méthanol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Ces expériences nous ont permis d'obtenir l'évolution en fonction de la température du réactif, des produits et principales espèces intermédiaires. Ces résultats sont représentés sur la figure VI-1.

Les espèces détectées lors de l'oxydation du méthanol sont le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde et l'hydrogène.

c) Confrontation modèle-expérience

La figure VI-1 présente une confrontation entre la modélisation (lignes et petits symboles) et nos résultats expérimentaux (grands symboles) en réacteur auto-agité. Sur cette figure, les profils des espèces sont globalement en accord avec l'expérience, à l'exception des quantités de H_2O et de H_2 qui sont sous-estimées par le modèle.

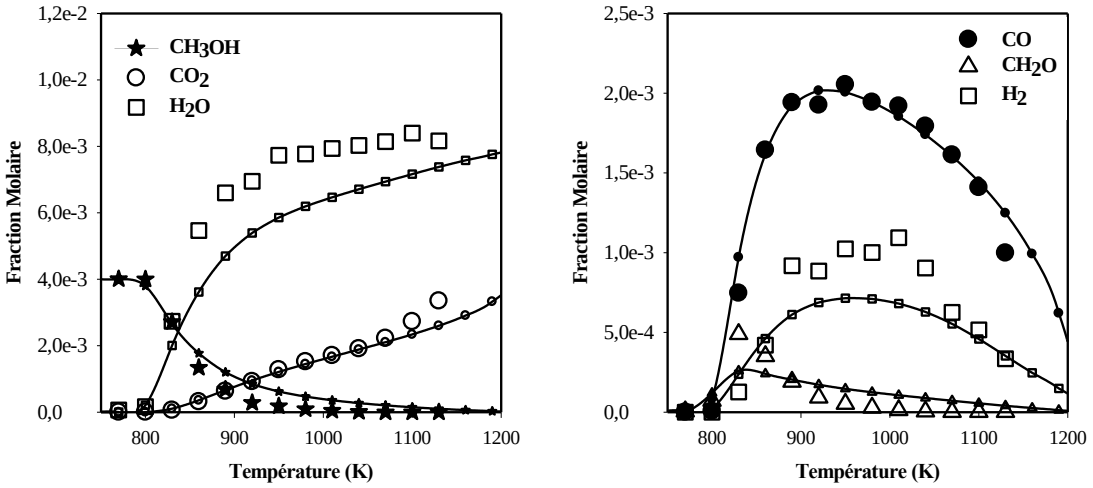
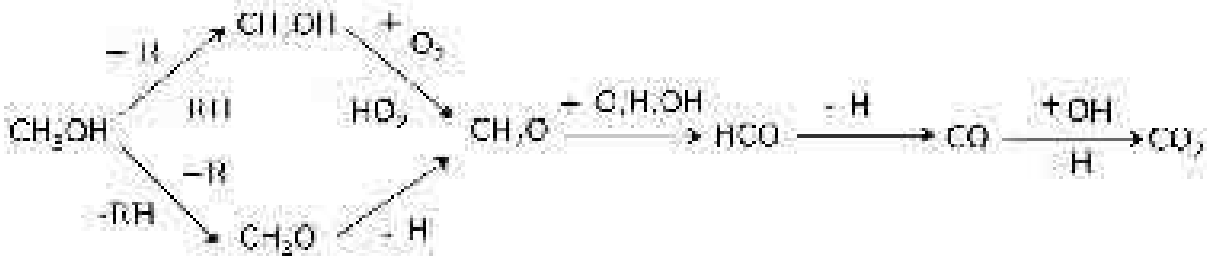


Figure VI-1 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du méthanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 4000 ppm de CH_3OH ; φ=1 ; τ=0,7 s

- Analyse de voies réactionnelles

Grâce au mécanisme, nous avons effectué une analyse de voies réactionnelles afin de déterminer les chemins préférentiels lors de l'oxydation du méthanol en réacteur auto-agité à richesse 1 et à haute pression (10 atm). Les résultats montrent que le méthanol réagit par réactions de métathèse avec les radicaux OH, HO_2 et H en formant deux radicaux distincts CH_2OH et CH_3O. Ces radicaux réagissent ensuite pour former successivement le formaldéhyde, HCO, CO et CO_2. L'oxydation du méthanol peut-être globalement résumée par le schéma suivant :



- Analyse de sensibilité

Grâce au modèle, nous avons effectué une analyse de sensibilité à φ=1 et à P=10 atm afin de

déterminer les réactions les plus importantes lors de l'oxydation du méthanol. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure VI-2. Comme on peut le constater, les réactions qui influencent l'oxydation du méthanol sont les réactions de métathèse avec les radicaux OH, HO_2 et H. Ces réactions favorisent la consommation du méthanol. L'influence de la réaction $HO_2 + OH \rightleftarrows H_2O + O_2$ augmente continuellement avec la température et présente un coefficient de sensibilité positif. Cette réaction transforme deux radicaux dont un très réactif en deux molécules stables, ce qui entraîne une baisse globale de la réactivité. Les réactions $H_2O_2 + OH \rightleftarrows HO_2 + H_2O$ et $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$ entraînent également une baisse de réactivité car elle consomme des radicaux OH très réactifs.

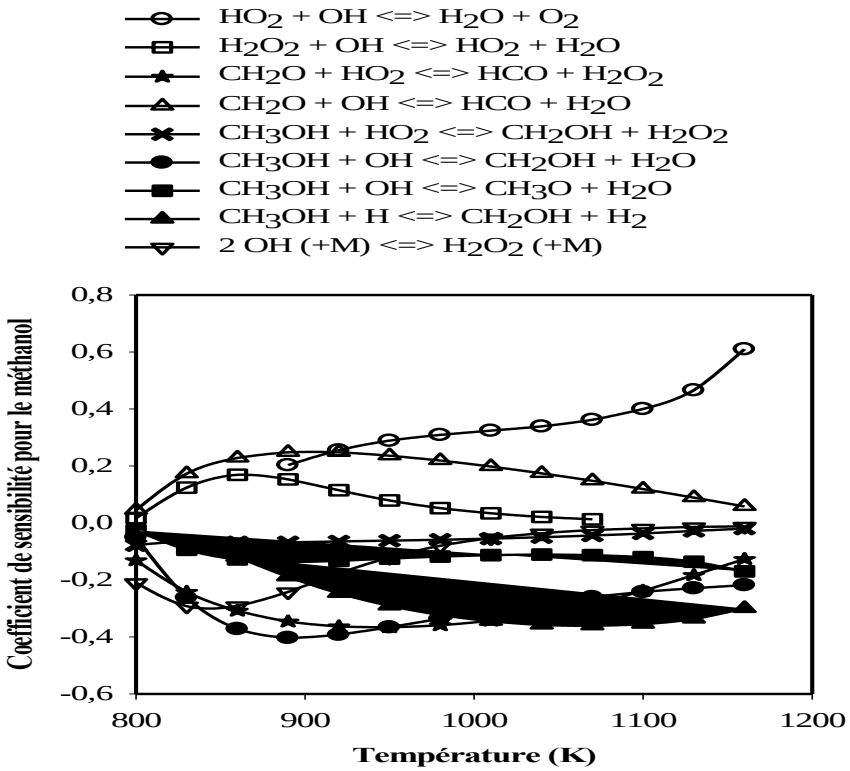


Figure VI-2 : Coefficient de sensibilité pour le méthanol lors de son oxydation en réacteur auto-agité, à 10 atm et φ=1

1.2. Oxydation de l'éthanol

a) Conditions expérimentales

Comme le méthanol, la cinétique d'oxydation de l'éthanol a été étudiée très largement et est considérée comme bien connue [9-11]. Dans ce travail de thèse, nous avons étudié l'oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité à 10 atm. Le tableau VI-2 résume les conditions expérimentales.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Ethanol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$20{,}00.10^{-3}$	$9{,}780.10^{-1}$	0,3	770-1130
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$10{,}00.10^{-3}$	$9{,}880.10^{-1}$	0,6	770-1130
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$6{,}00.10^{-3}$	$9{,}920.10^{-1}$	1	770-1130
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$2{,}30.10^{-3}$	$9{,}963.10^{-1}$	2	770-1220

Tableau VI-2 : Oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les expériences sur l'oxydation de l'éthanol ont été menées à quatre richesses, respectivement φ=0,3 ; 0,5 ; 1 et 2. Les espèces identifiées au cours de cette oxydation sont le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, l'eau, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde, le méthane, l'éthane, l'éthylène et l'hydrogène.

c) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-3 à VI-6 présentent une comparaison entre les résultats simulés et expérimentaux pour l'oxydation de l'éthanol. Il apparaît que le modèle reproduit correctement le profil de concentration de l'éthanol pour toutes les richesses.

Les quantités de CO et CO_2 sont bien reproduites sur tout le domaine de température, mais le modèle sous-estime légèrement celle de CO au-dessus de 950 K pour les richesses 1 et 2. Les quantités du méthane, de l'éthylène et de l'hydrogène sont assez bien reproduites. Le modèle prédit convenablement la quantité maximale d'acétaldéhyde, mais surestime sa production. Le modèle reproduit d'une manière correcte la formation du formaldéhyde. En milieu riche, la quantité d'eau est sous estimée au-delà de 900 K.

L'accord entre les résultats expérimentaux et simulés est globalement satisfaisant.

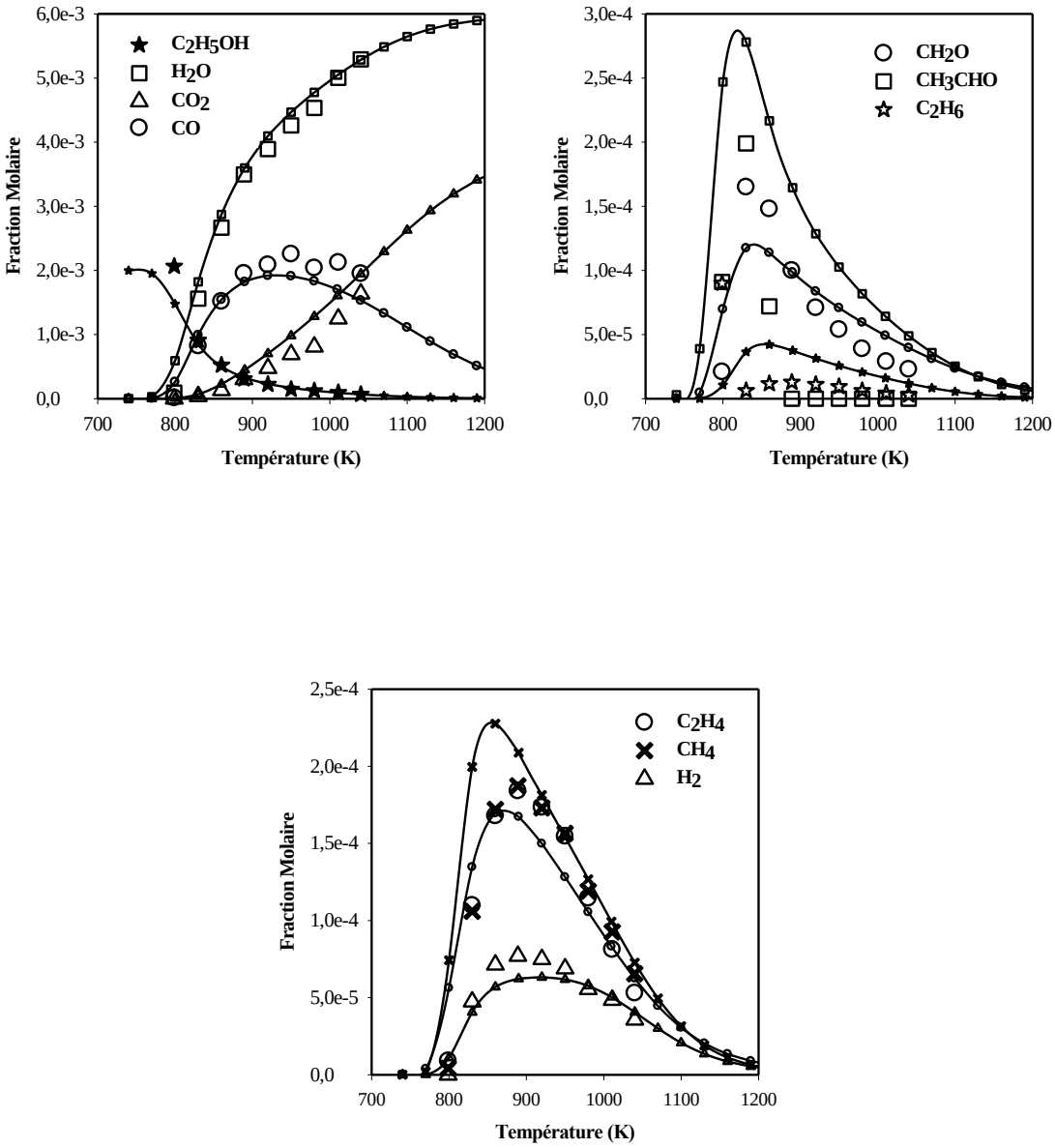


Figure VI-3 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm de C_2H_5OH, φ=0,3, τ=0,7 s

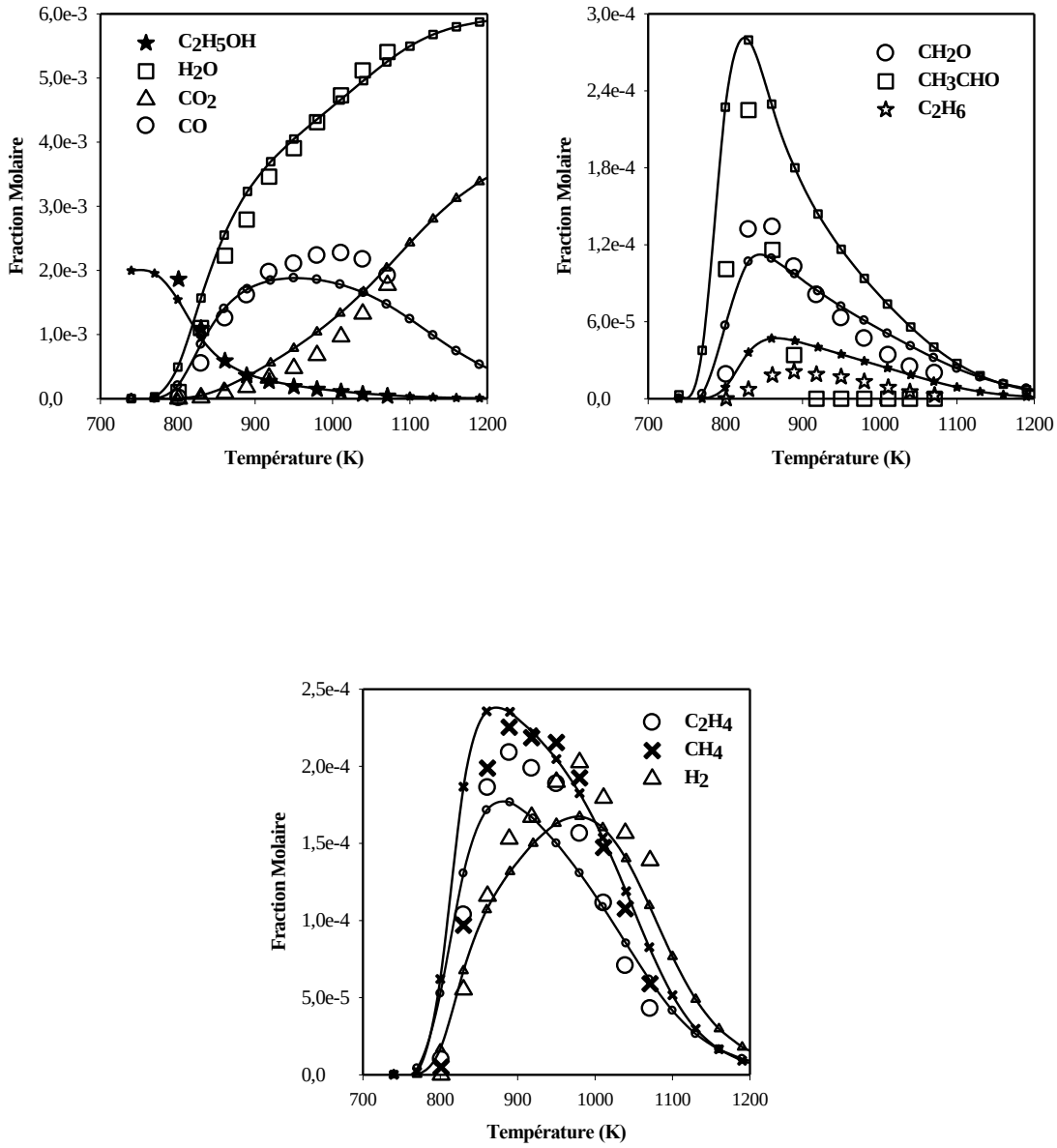


Figure VI-4 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm de C_2H_5OH, φ=0,6, τ=0,7 s

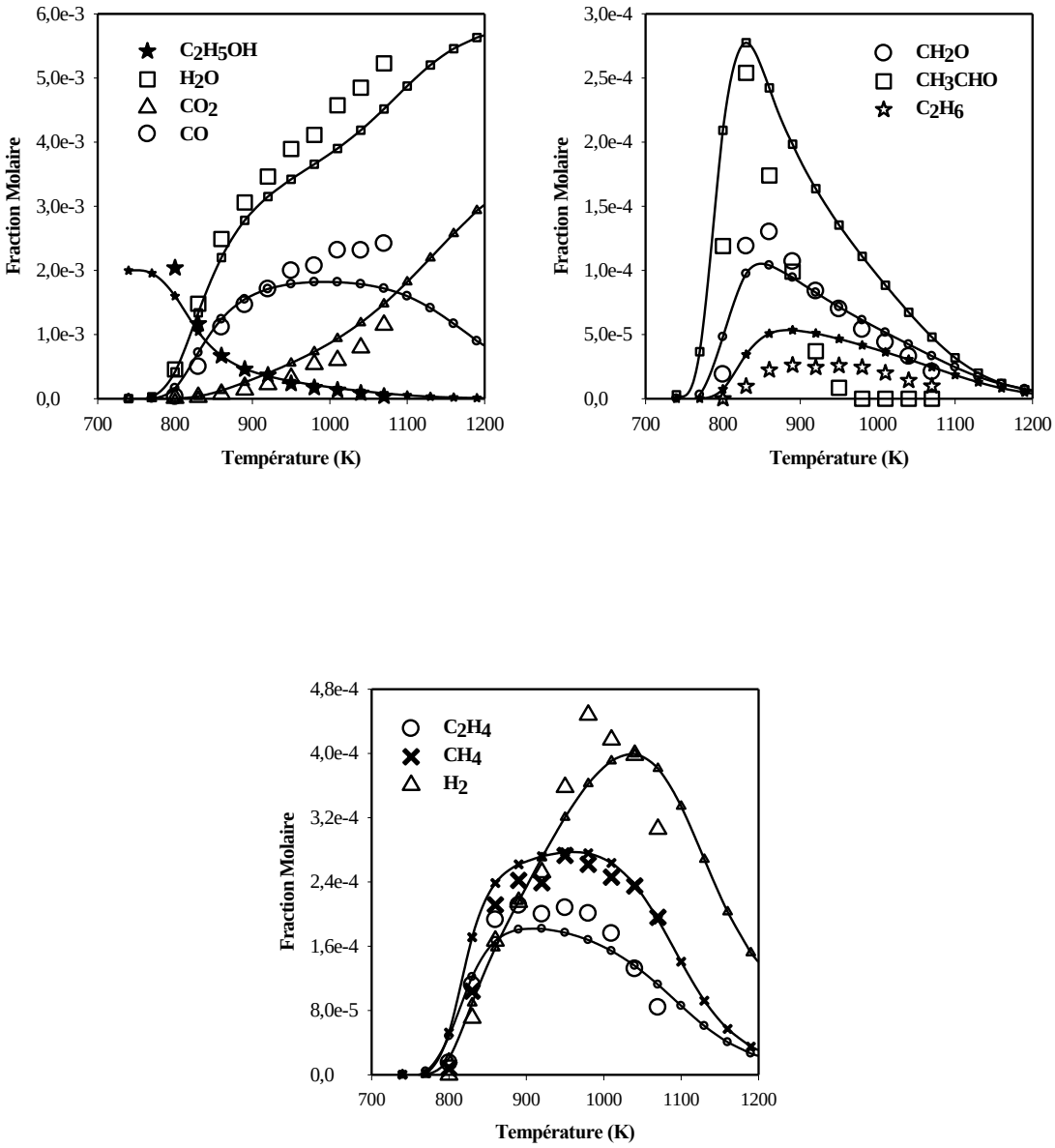


Figure VI-5 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm de C_2H_5OH, φ=1, τ=0,7 s

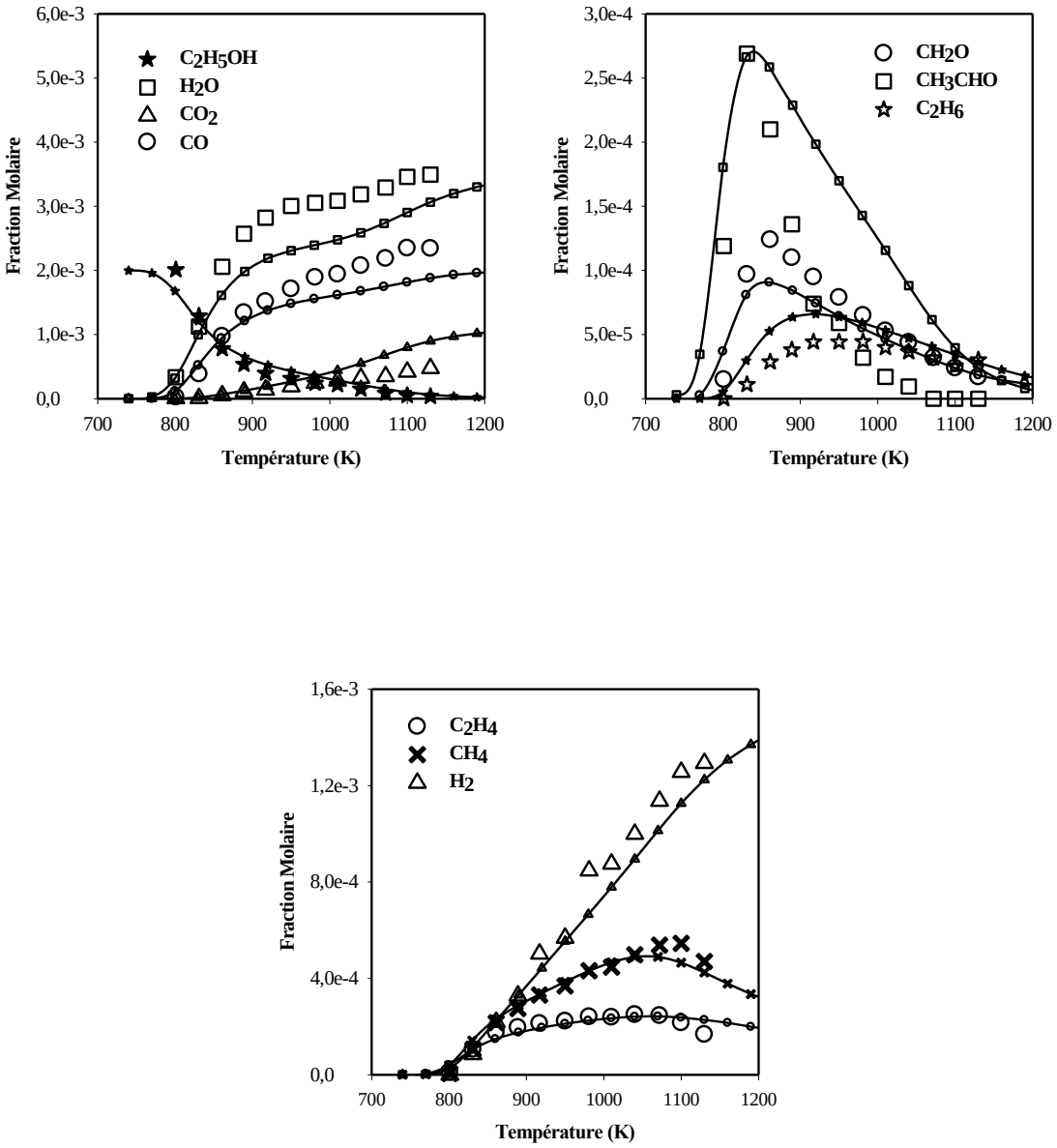


Figure VI-6 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'éthanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm de C_2H_5OH, φ=2, τ=0,7 s

- Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stœchiométrie et à haute pression pour déterminer les principales voies de dégradation de l'éthanol pour deux températures : 800 et 950 K.

A 800 K, l'éthanol réagit essentiellement par réaction de métathèse avec le radical OH (83%) pour former deux radicaux CH_3CHOH (radical majoritaire) et CH_2CH_2OH.

Le radical CH_3CHOH réagit ensuite quasi-totalement avec O_2 pour former de l'acétaldéhyde qui est à son tour oxydé en CH_3CO. Le radical CH_2CH_2OH quant à lui, se décompose en C_2H_4 et OH.

A 950 K, l'éthanol réagit toujours en grande partie par des réactions de métathèse avec le radical OH (67,1%), mais également avec H (11,8%) pour former le radical CH_3CHOH qui subit à son tour les mêmes étapes de dégradations qu'à T=800 K.

- Analyse de sensibilité

Nous avons réalisé une analyse de sensibilité pour l'éthanol à φ=1 afin de connaître les réactions les plus influentes sur la consommation du composé. Les résultats sont présentés sur la figure VI-7.

Sur cette figure, on s'aperçoit que l'oxydation de l'éthanol est particulièrement sensible aux réactions de métathèse avec les radicaux OH ($C_2H_5OH + OH \rightleftarrows CH_3CHOH + H_2O$) et l'atome H dans une moindre mesure ($C_2H_5OH + H \rightleftarrows CH_3CHOH + H_2$). L'oxydation de l'éthanol est également sensible aux réactions des toutes petites espèces et principalement : $H + O_2 \rightleftarrows O + OH$ (réaction de ramification) et $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_3O + OH$ (réaction de propagation). Elles jouent un rôle important car elles produisent des radicaux de OH, ce qui favorise ainsi la consommation de l'hydrocarbure initial. Aux plus hautes températures (>1000 K), l'oxydation de l'éthanol apparaît également sensible aux réactions de décomposition unimoléculaire : $C_2H_5OH\ (+M) \rightleftarrows CH_3 + CH_2OH$ et $C_2H_5OH\ (+M) \rightleftarrows C_2H_4 + H_2O\ (+M)$.

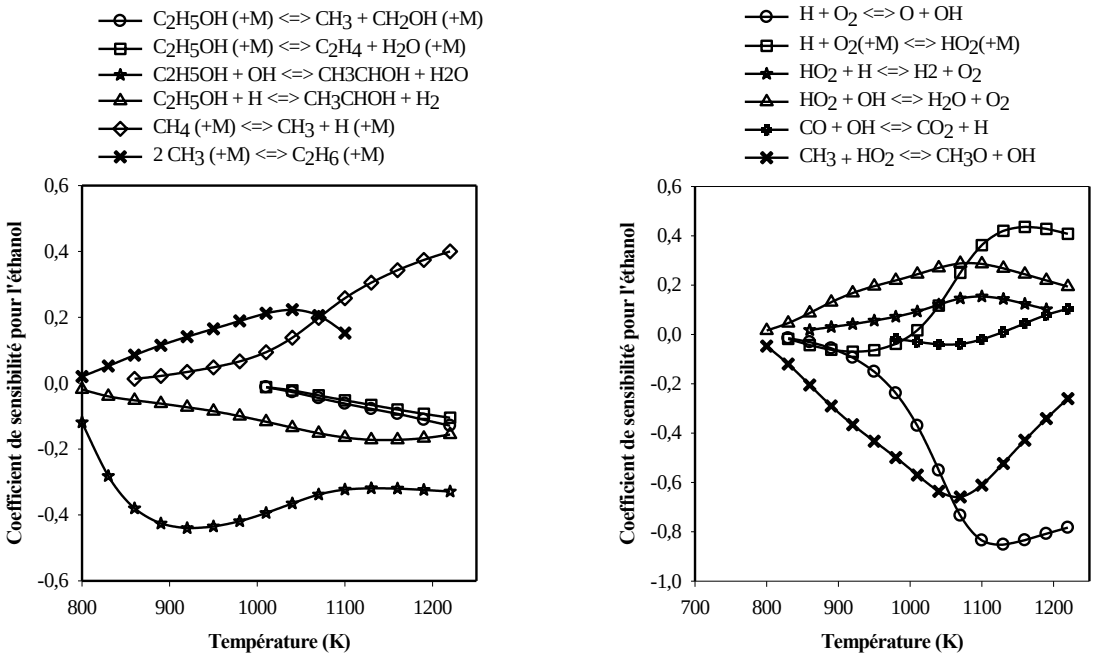


Figure VI-7 : Coefficient de sensibilité pour l'éthanol lors de son oxydation en réacteur auto-agité, à 10 atm et φ=1

1.3. Oxydation du butan-1-ol

a) Conditions expérimentales

Le butan-1-ol a été oxydé en réacteur auto-agité à 10 atm dans différentes conditions expérimentales qui sont résumées dans le tableau VI-4.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Butan\text{-}1\text{-}ol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$12{,}00.10^{-3}$	$9{,}870.10^{-1}$	0,5	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}00.10^{-3}$	$9{,}930.10^{-1}$	1	770-1190
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}00.10^{-3}$	$9{,}960.10^{-1}$	2	770-1190
10	0,7	$1{,}5.10^{-3}$	$2{,}30.10^{-3}$	$9{,}963.10^{-1}$	4	770-1190

Tableau VI-4 : Oxydation du butan-1-ol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les résultats obtenus pour l'oxydation du butan-1-ol (grands symboles), sont représentés sur les figures VI-7 à VI-10. Les espèces majoritairement formées sont : H_2O, CO_2, CO, H_2, CH_2O, C_2H_4 et CH_4. Les espèces minoritaires sont : C_3H_6, 1-C_4H_8, l'acétaldéhyde et l'acétylène.

c) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-7 à VI-10 présentent les comparaisons entre la simulation (lignes et petits symboles) et les profils de fractions molaires obtenus expérimentalement (grands symboles).

En milieu pauvre (φ=0,5), le modèle reproduit assez convenablement le profil des espèces à l'exception de l'acétaldéhyde et l'hydrogène qui sont surestimés par le modèle. La consommation de l'hydrocarbure initial, à savoir le butan-1-ol, est bien reproduite.

En milieu stœchiométrique (φ=1), le modèle reproduit également assez bien les profils des différentes espèces intermédiaires ; le profil de l'hydrogène est mieux reproduit qu'en milieu pauvre, mais l'acétaldéhyde reste surestimée par le modèle.

En milieu riche (φ=2 et 4), le modèle simule correctement la consommation de l'hydrocarbure et la plupart des espèces formées. Le profil de H_2O est légèrement sous-estimé par le modèle.

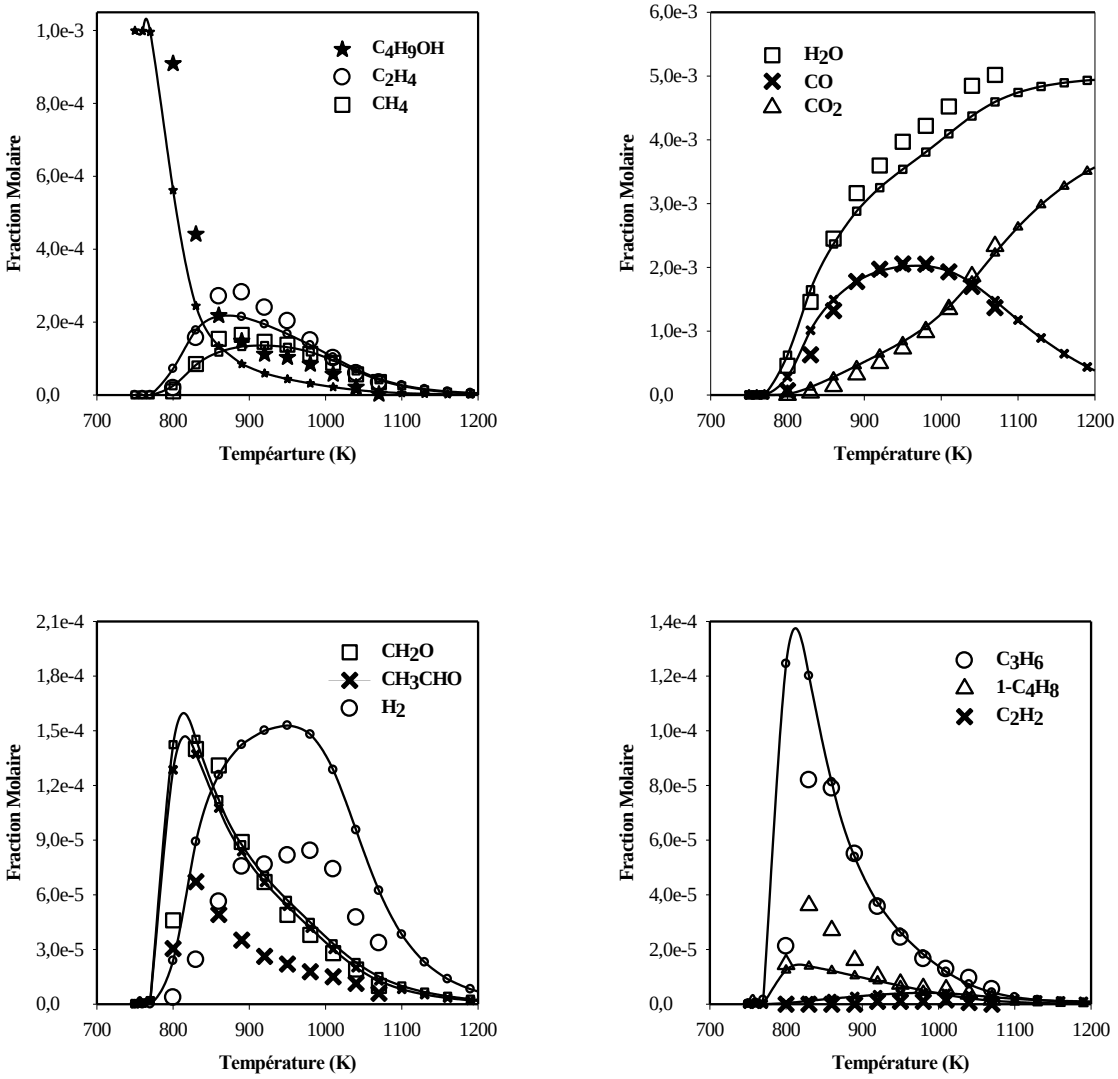


Figure VI-7 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de C_4H_9OH, φ=0,5, τ=0,7 s

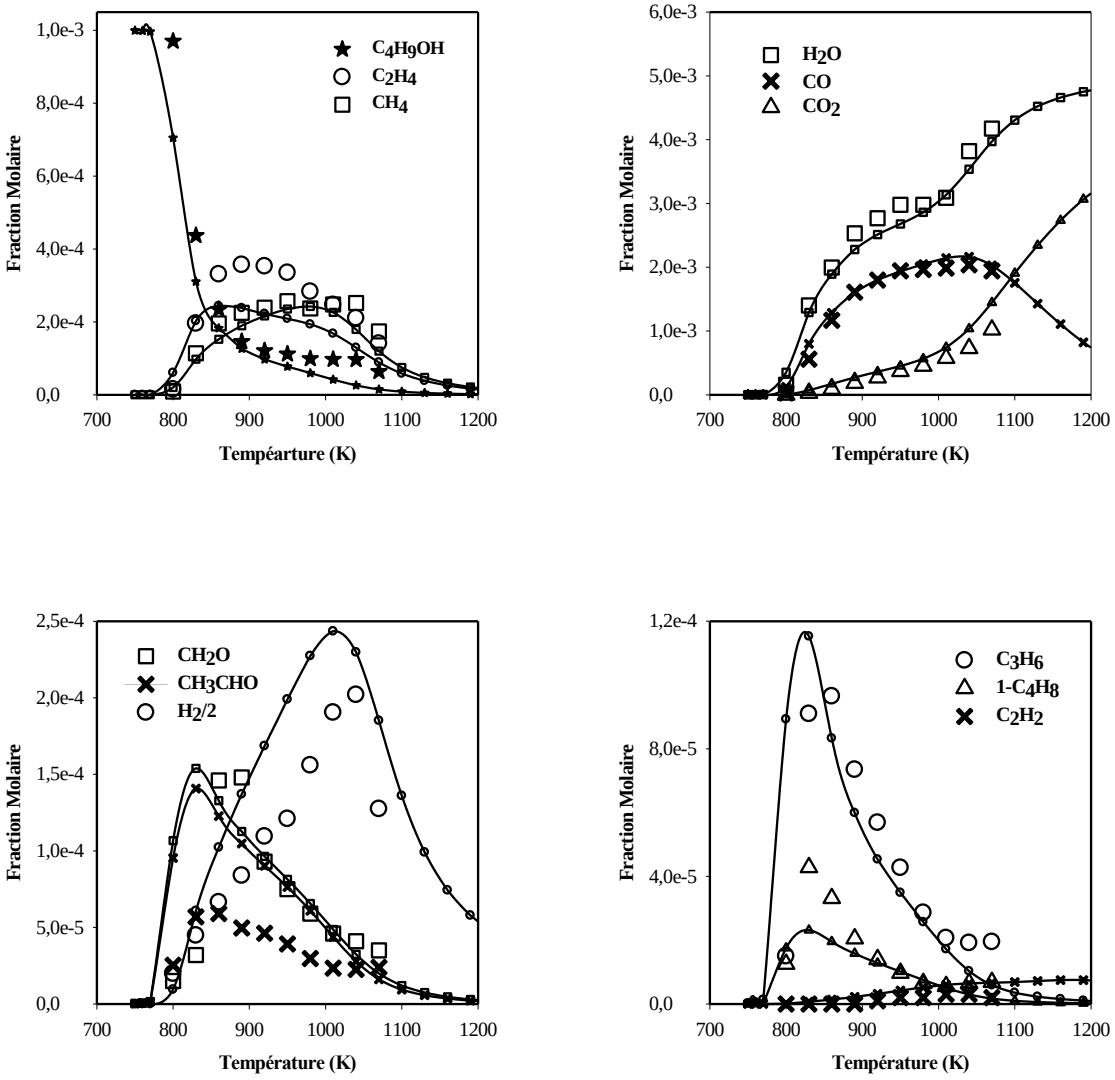


Figure VI-8 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de C_4H_9OH, φ=1, τ=0,7 s

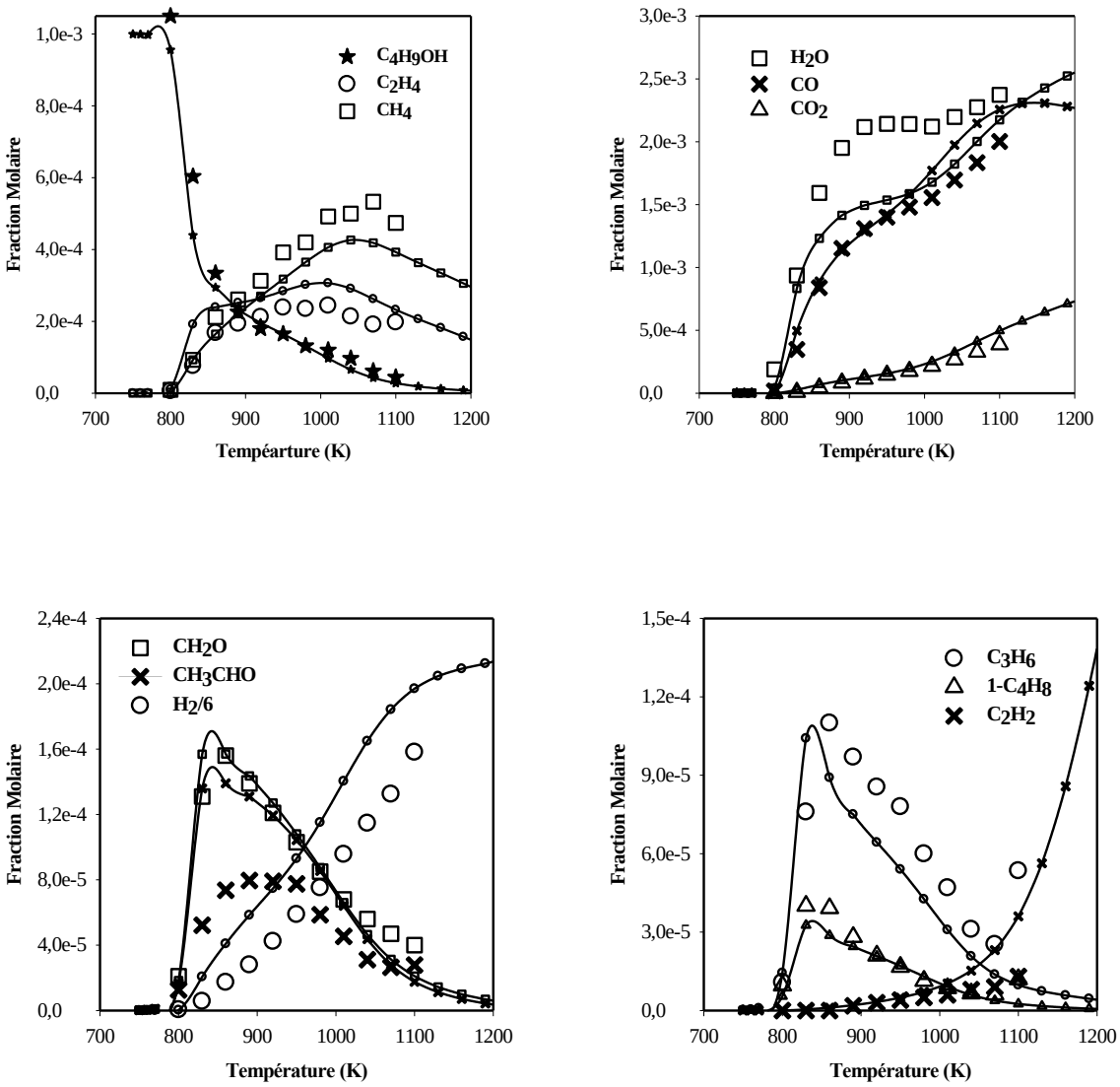


Figure VI-9 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de C_4H_9OH, φ=2, τ=0,7 s

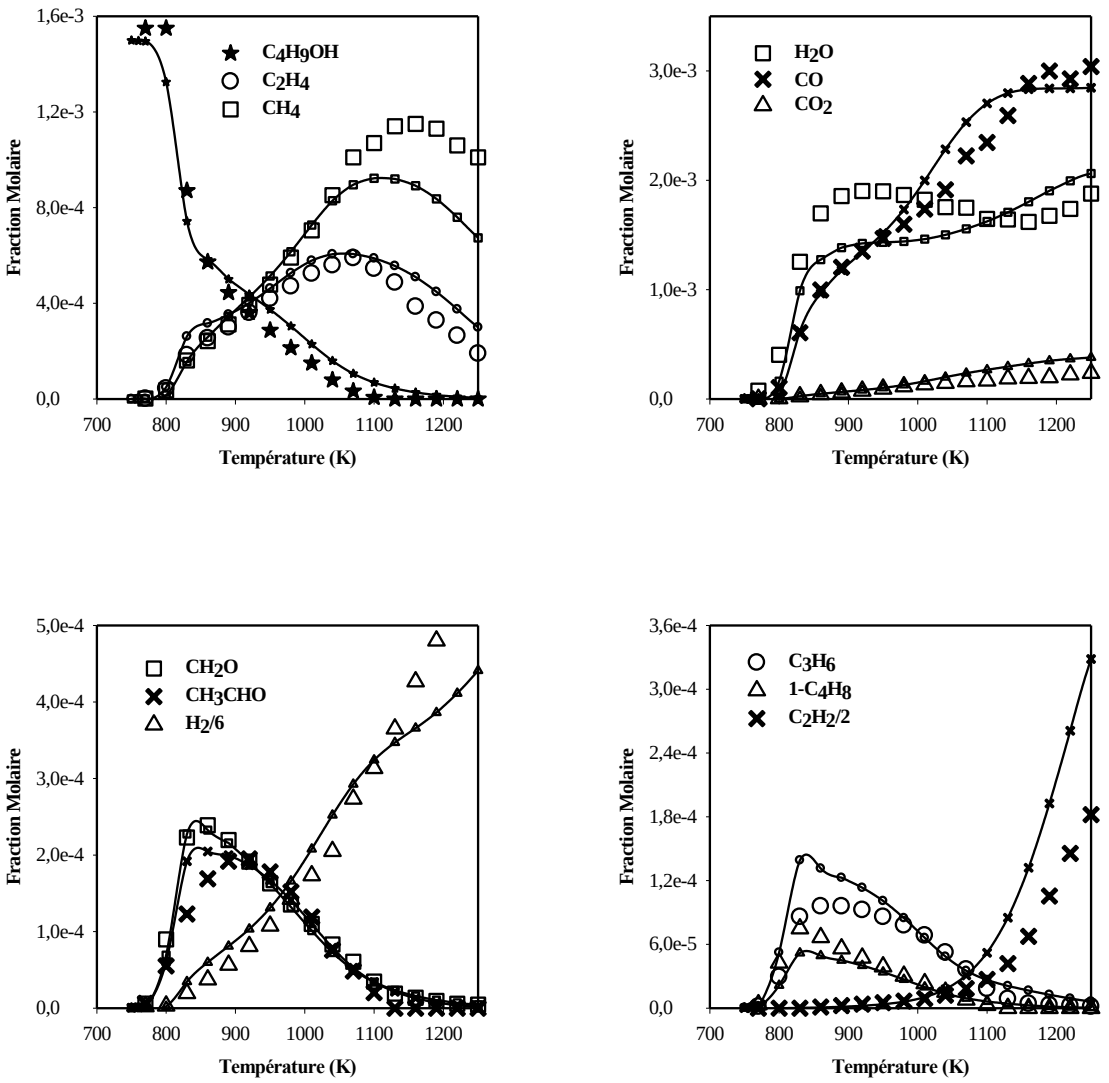


Figure VI-10 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du butan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1500 ppm de C_4H_9OH, φ=4, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

Nous avons effectué une analyse de vitesse à la stœchiométrie (φ=1), à haute pression (10 atm) et à T=980 K afin de déterminer les chemins réactionnels majoritaires lors de l'oxydation du butan-1-ol. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure VI-11.

A 980 K, le butan-1-ol est consommé par des réactions de métathèse avec les radicaux H (13,7%) et OH (79,6%) pour former cinq différents radicaux. Ces radicaux peuvent ensuite réagir, soit par des réactions d'isomérisation afin de redistribuer les isomères, soit par des réactions de décomposition (rupture par β-scission).

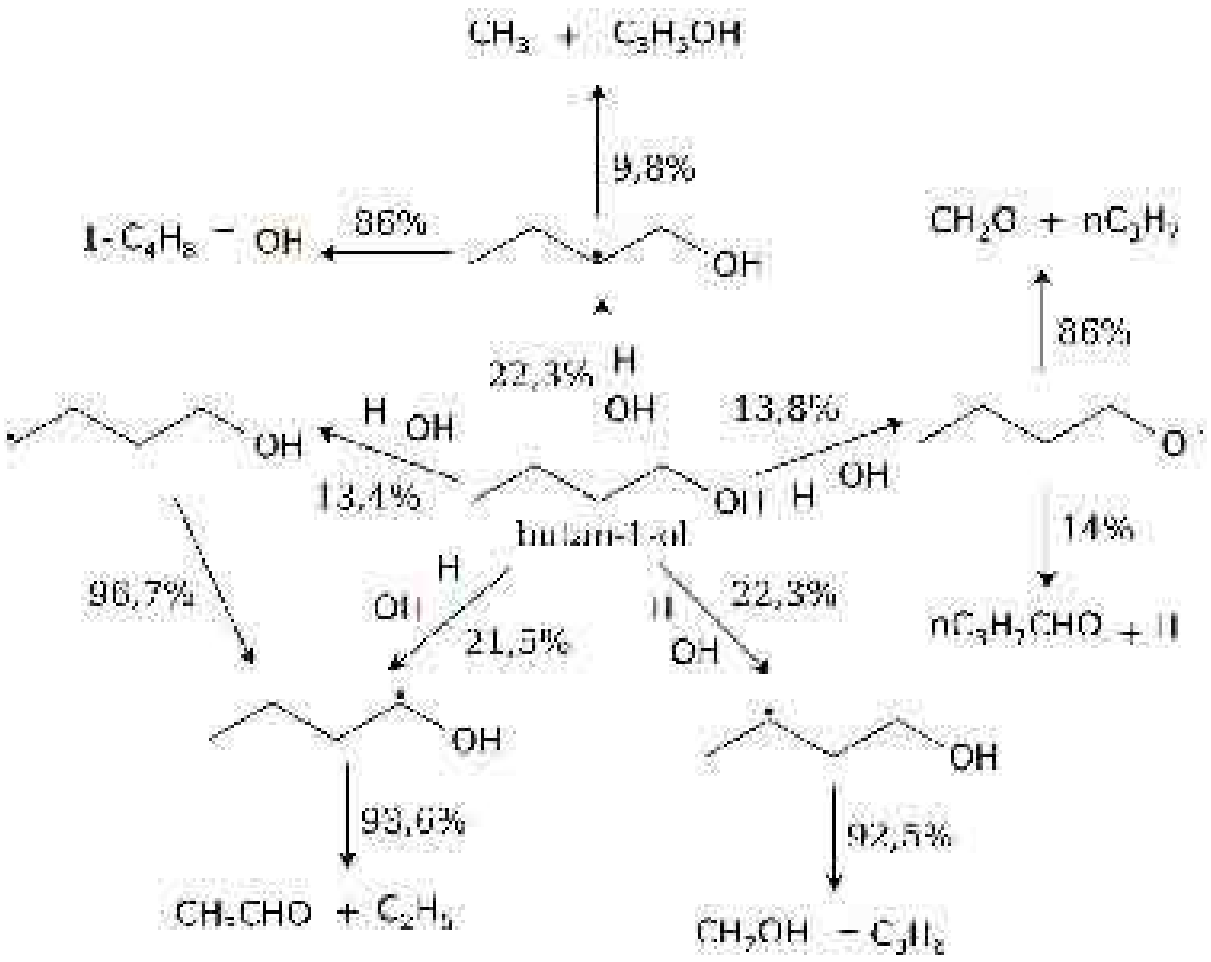


Figure VI-11- : Voies de dégradation principales de l'oxydation du butan-1-ol à T=980 K en réacteur-agité

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité à φ=1 et à T=980 K afin de déterminer les réactions les plus influentes sur la consommation du butan-1-ol en réacteur auto-agité. La figure VI-12 indique les résultats de cette analyse pour T = 980 K.

A cette température, les réactions les plus influentes sont les réactions de métathèse avec le radical OH : elles favorisent la consommation du butan-1-ol. Les réactions $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_3O + OH$ (S= -0,481) et $H + O_2 \rightleftarrows O + OH$ (S= -0,259) présentent des coefficients de sensibilité négatif : elles produisent toutes deux un radical hydroxyle OH très réactif favorisant ainsi la consommation du butan-1-ol. Par contre la réaction $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_4 + O_2$ (S=0,378) tend à ralentir cette consommation : elle transforme deux radicaux en 2 molécules stables. Parallèlement, les réactions $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$ (S= 0,178), $HO_2 + OH \rightleftarrows H_2O + O2$ (S=0,178) et $CH_4 + OH \rightleftarrows CH_3 + H_2O$ (S= 0,099), en consommant des radicaux OH, ralentissent également la consommation du butan-1-ol.

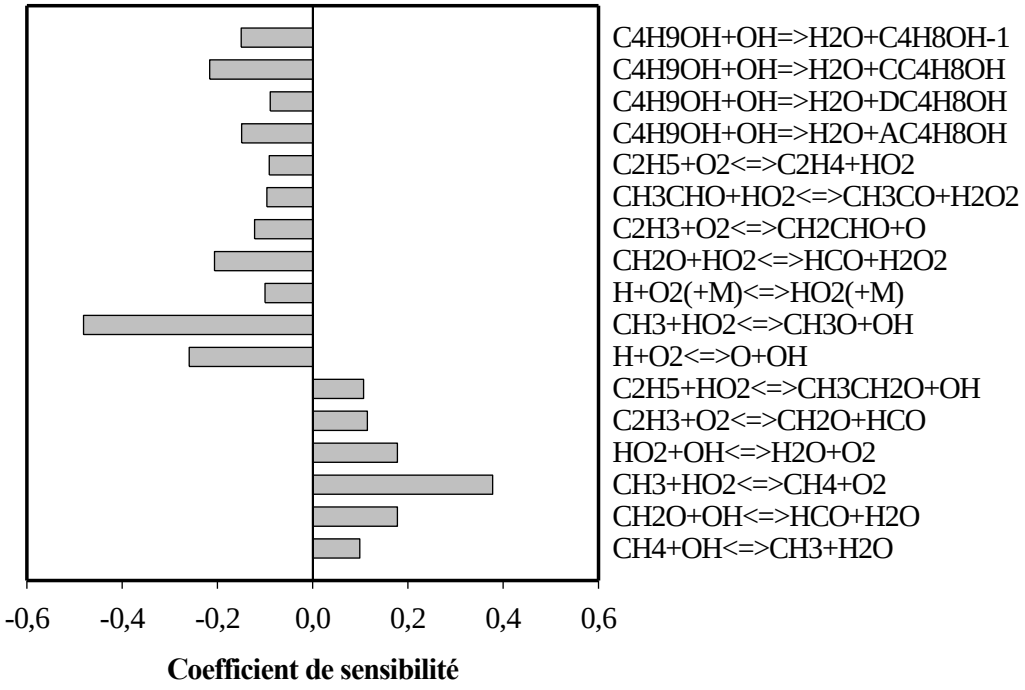


Figure VI-12 : Coefficient de sensibilité pour le butan-1-ol lors de son oxydation en réacteur-agité à T=980 K, à 10 atm et φ=1

d) Etude comparative de l'oxydation du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol

Pour comparer la réactivité du butan-1-ol à celle de ses isomères, nous avons également étudié en réacteur auto-agité le butan-2-ol et l'isobutanol (le tertbutanol n'a pas pu être étudié pour des raisons techniques : il est solide à température ambiante).

Le butan-2-ol et l'isobutanol ont donc été oxydés en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm) dans les mêmes conditions expérimentales que le butan-1-ol. Ces conditions expérimentales sont rappelées dans le tableau VI-5.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{(iso\ et\ 2)-butanol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$12{,}00.10^{-3}$	$9{,}870.10^{-1}$	0,5	770-1130
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}00.10^{-3}$	$9{,}930.10^{-1}$	1	770-1190
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}00.10^{-3}$	$9{,}960.10^{-1}$	2	770-1220
10	0,7	$1{,}5.10^{-3}$	$2{,}30.10^{-3}$	$9{,}963.10^{-1}$	4	770-1250

Tableau VI-5 : Oxydations du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

Les figures VI-13 à VI-16 présentent une comparaison des profils de fractions molaires des 3 isomères et des principales espèces communes à leur oxydation obtenus en réacteur auto-agité par jets gazeux.

Les profils du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol sont proches. Néanmoins, l'isobutanol est légèrement plus réactif que les autres molécules, excepté pour φ=4 où les profils sont très similaires. Cette légère différence de réactivité observée se traduit également par une quantité plus élevée de CO produite lors de l'oxydation de l'isobutanol. En revanche, les fractions molaires de méthane et d'éthylène issues de l'oxydation du 1-butanol et du butan-2-ol sont plus élevées que celle formée par l'isobutanol, excepté en milieu riche où les profils de fractions molaires de méthane sont similaires. Les quantités de formaldéhyde formées par le butan-1-ol sont plus élevées, tandis que la quantité maximale d'acétaldéhyde est obtenue à l'oxydation du butan-2-ol.

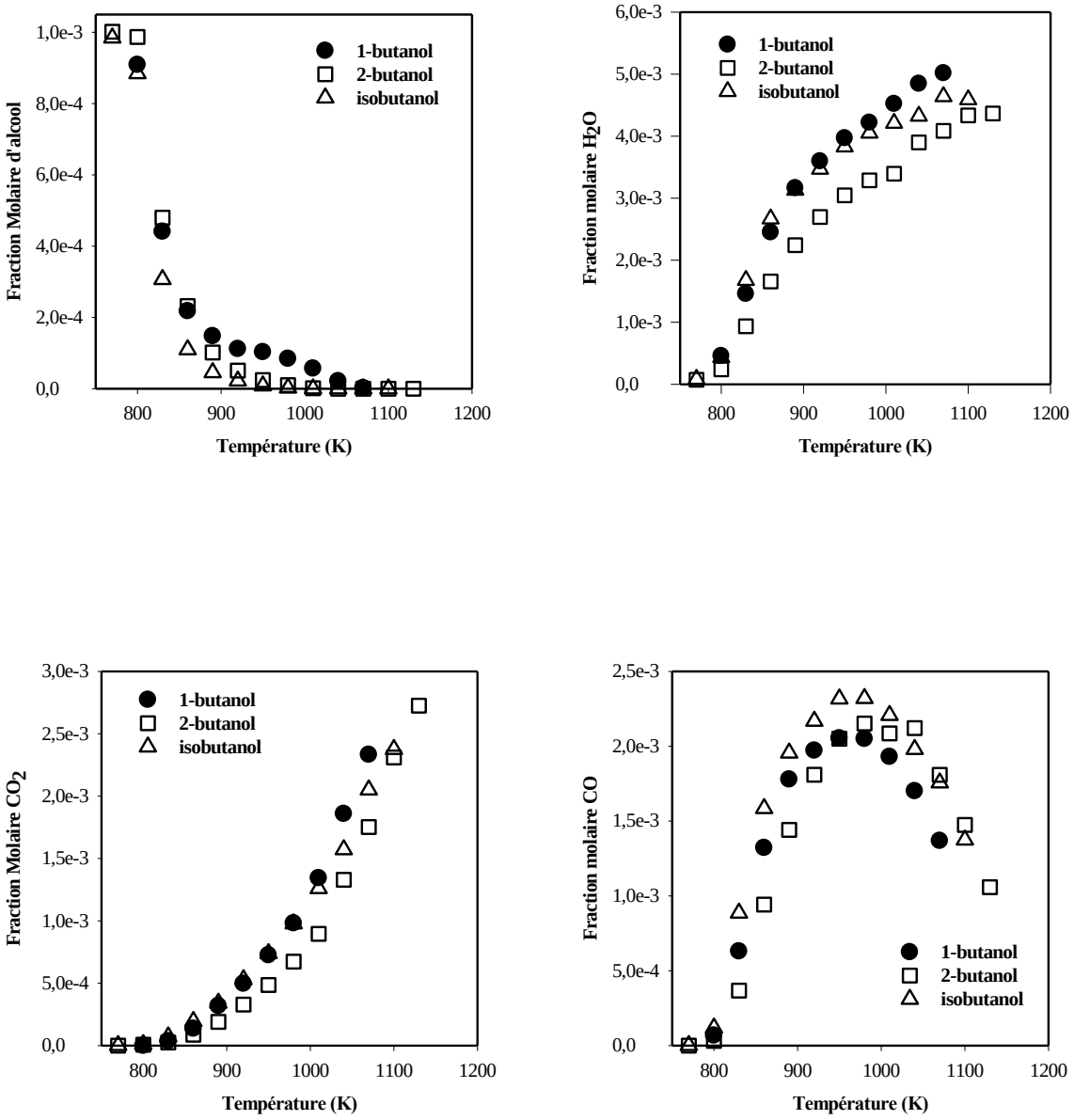


Figure VI-13 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

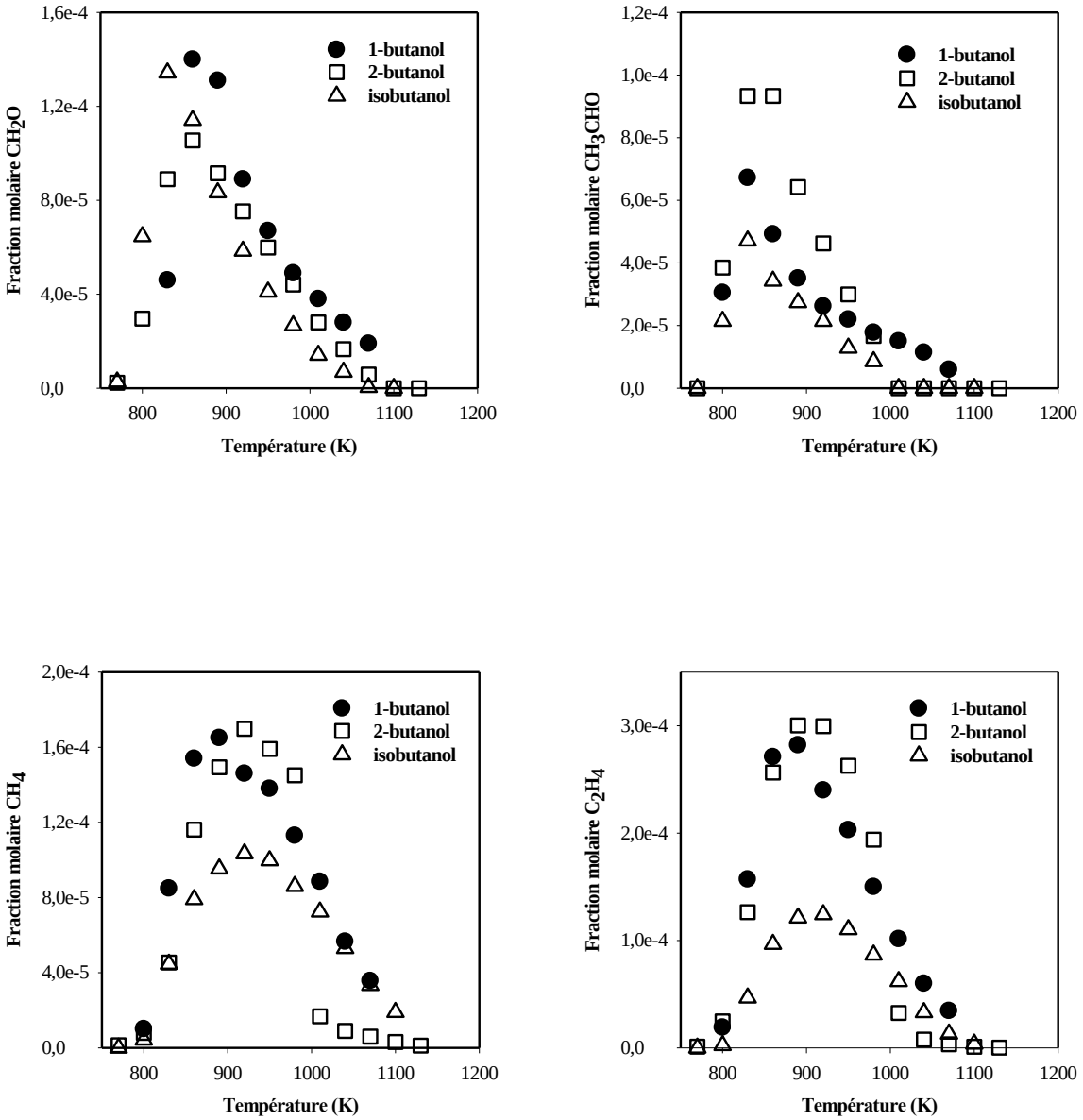


Figure VI-13 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=0,5 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

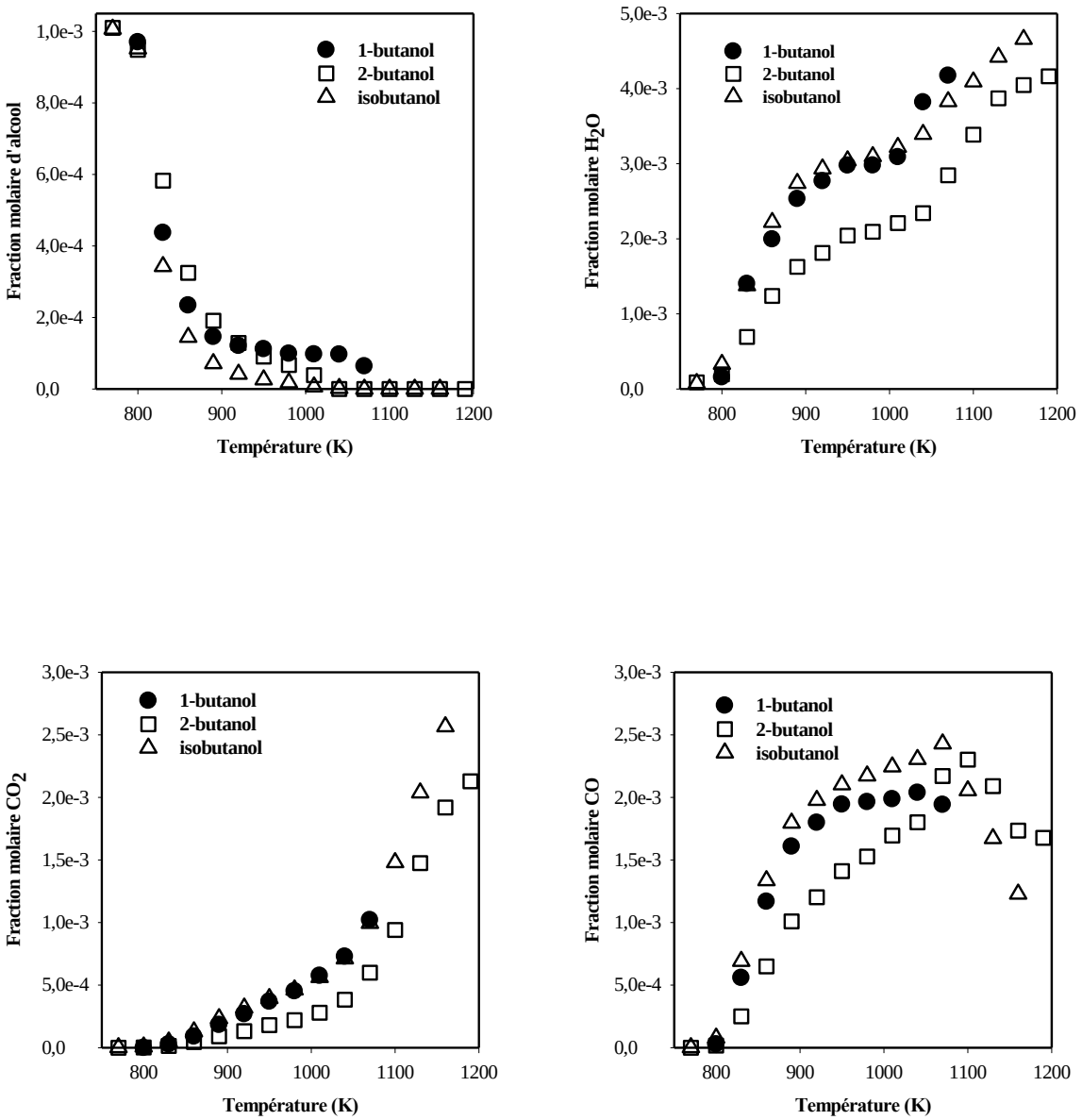


Figure VI-14 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

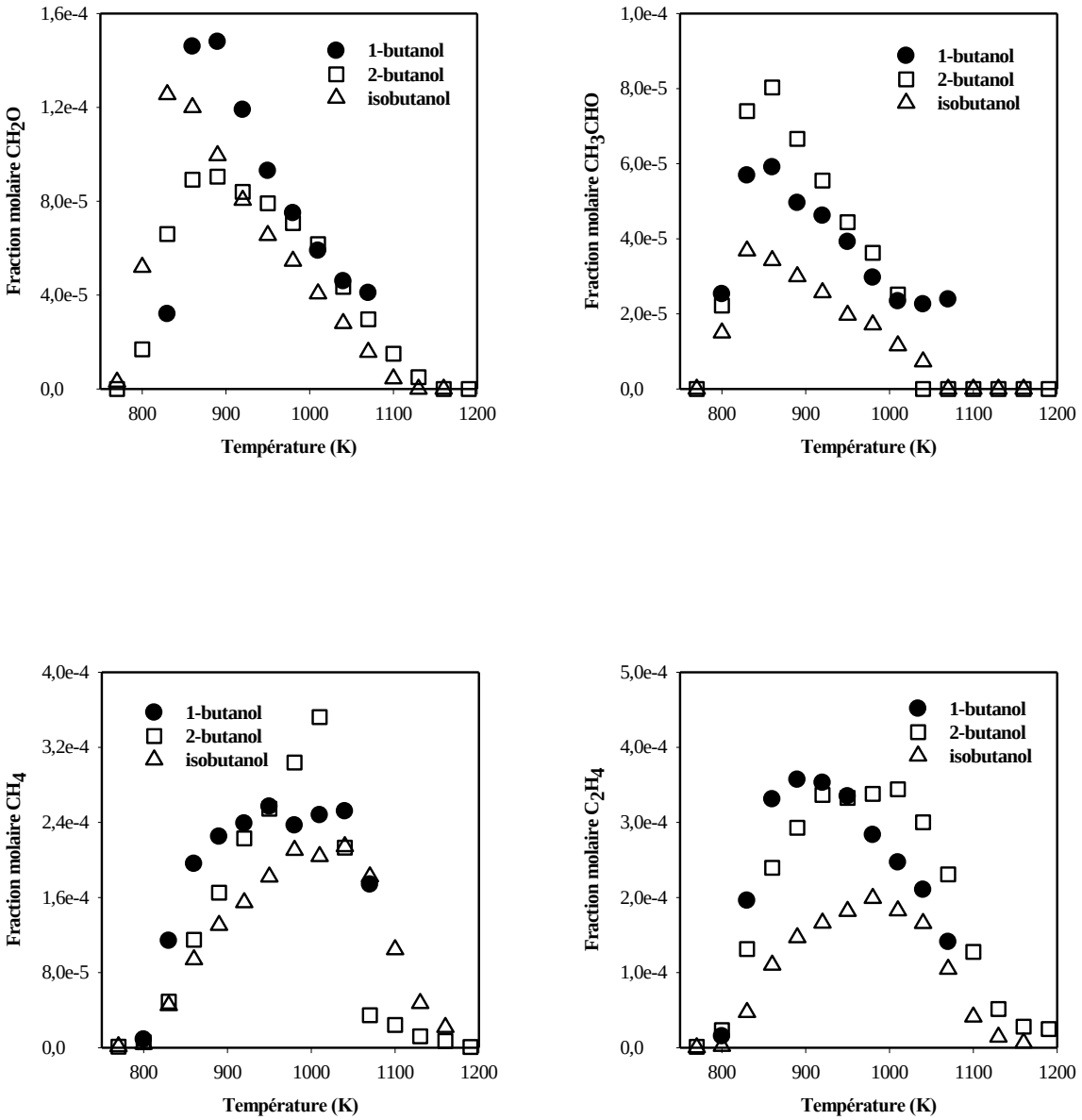


Figure VI-14 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=1 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

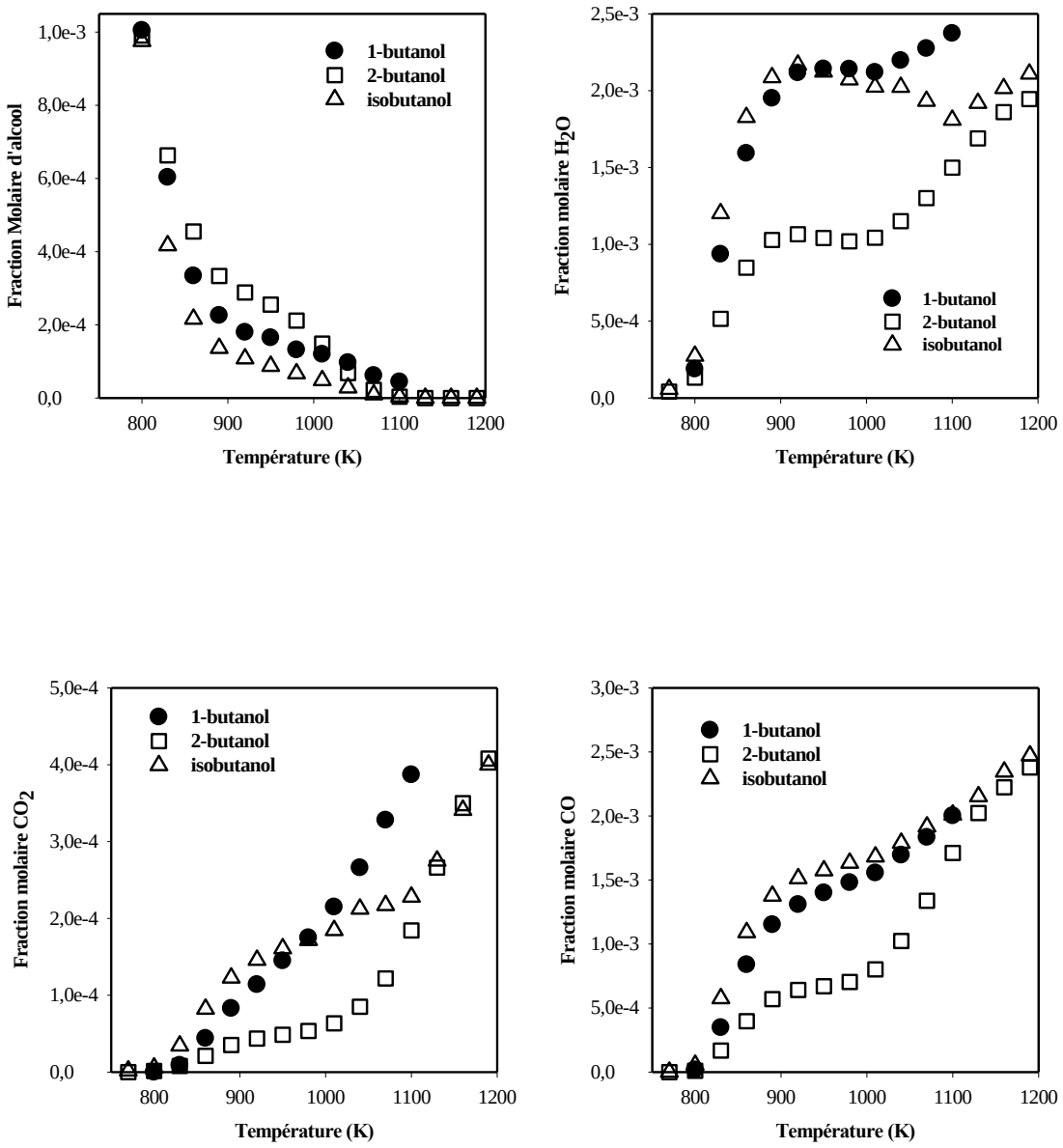


Figure VI-15 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=2 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

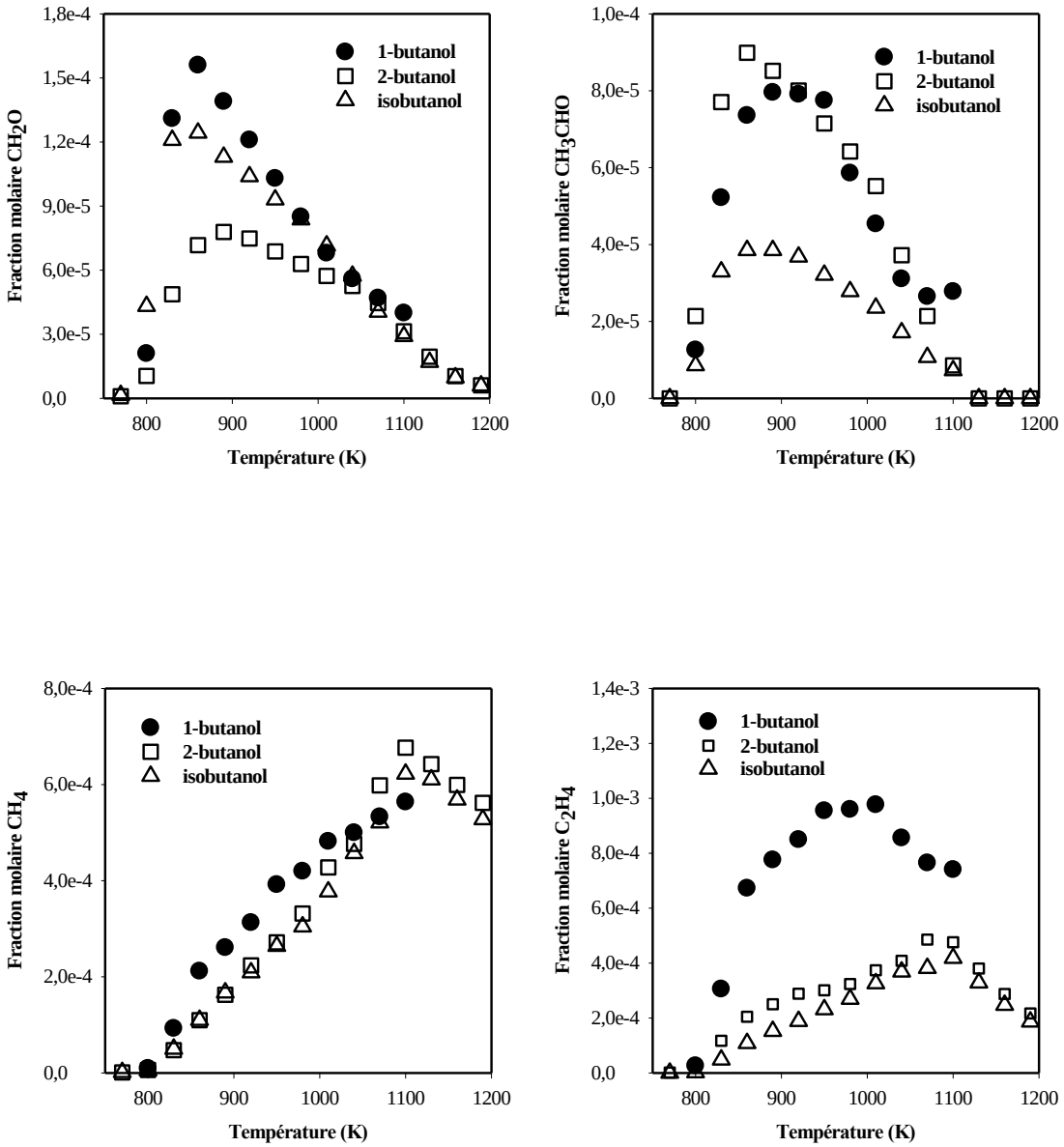


Figure VI-15 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=2 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

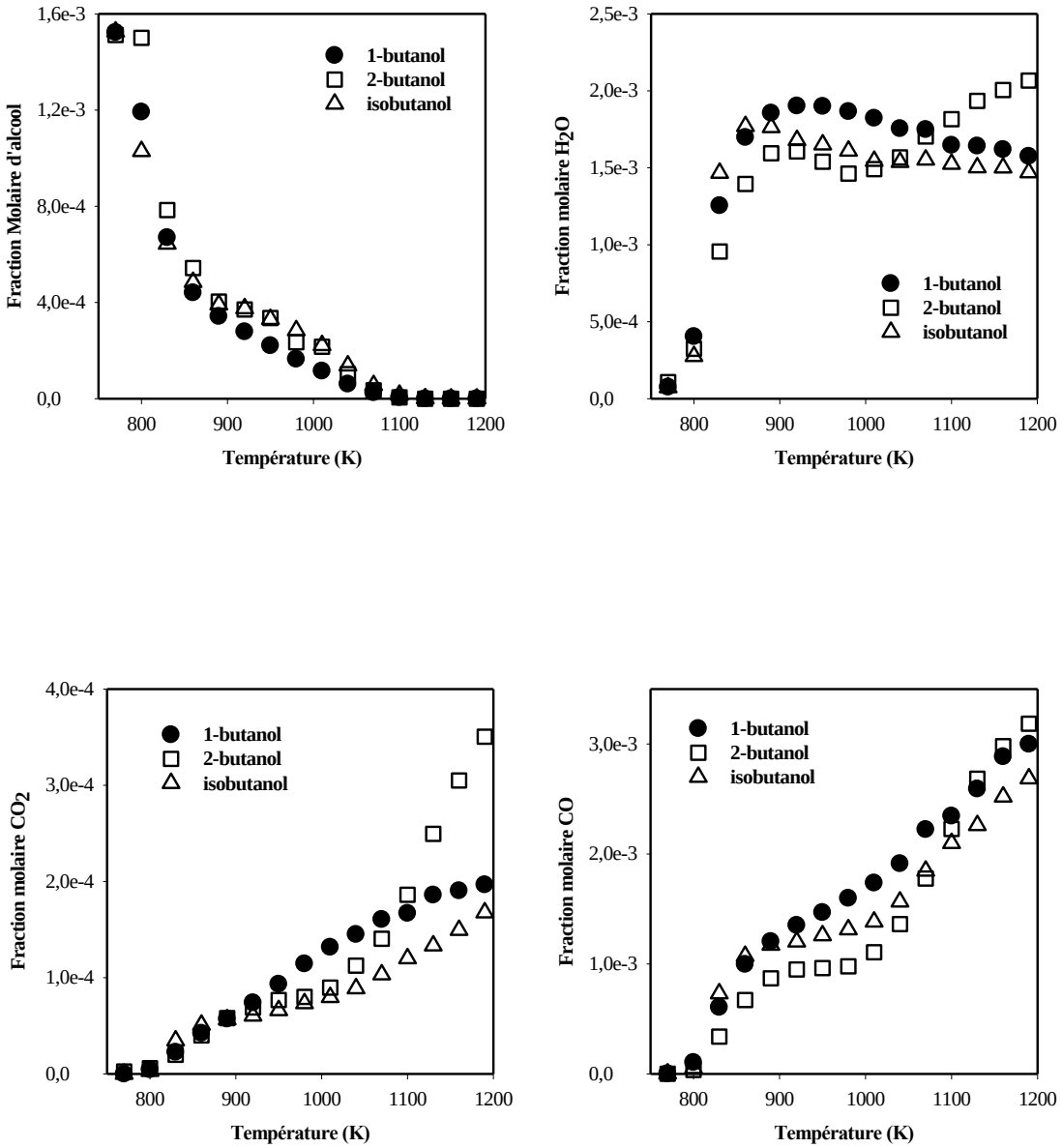


Figure VI-16 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=4 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

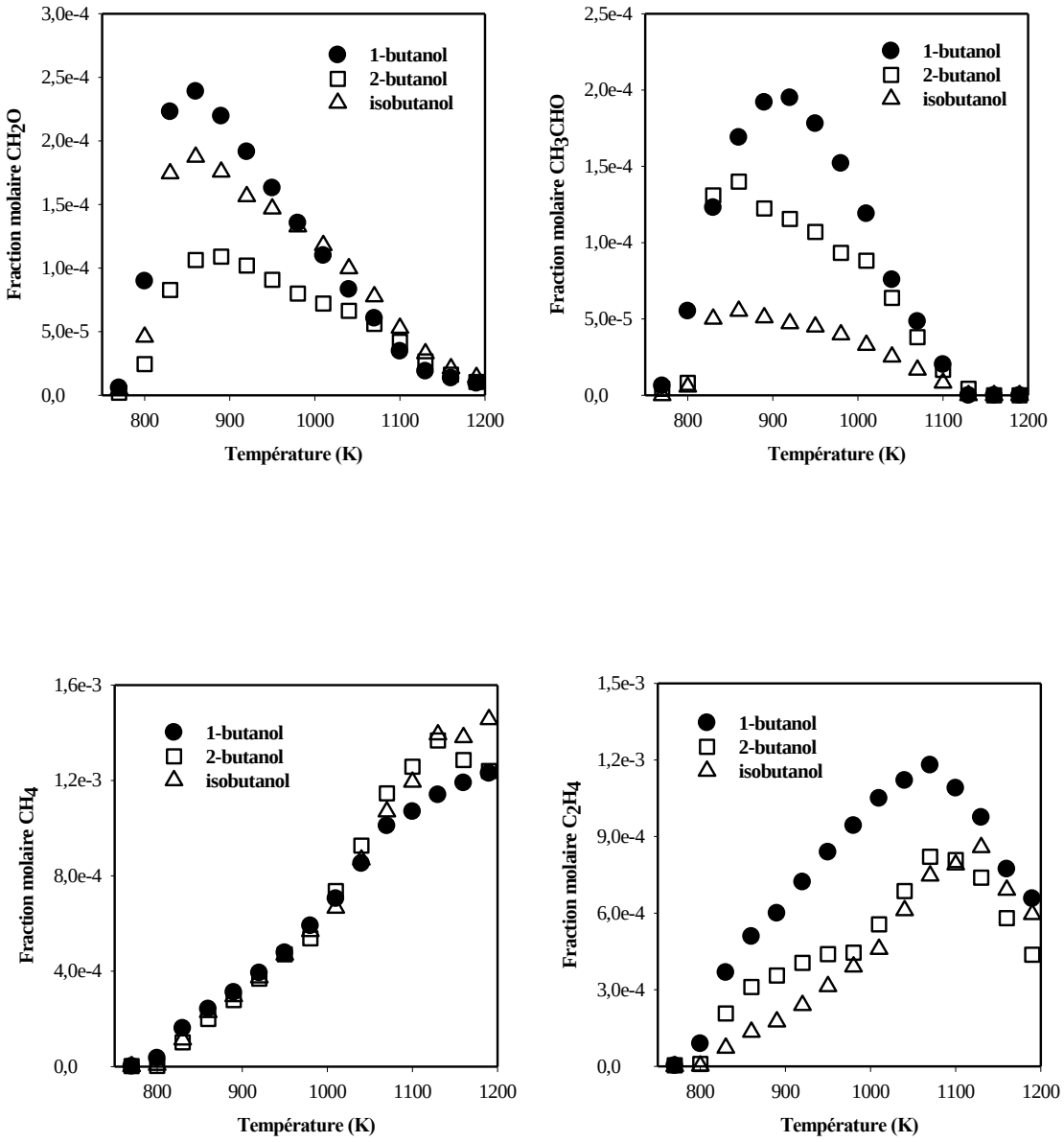


Figure VI-16 : Evolution en fonction de la température de la formation des principales espèces lors des oxydations du butan-1-ol, du butan-2-ol et de l'isobutanol en réacteur auto-agité : P=10 atm ; φ=4 ; τ=0.7s ; X_{HC}=0,1%

e) Confrontation des résultats expérimentaux et simulés à partir d'un modèle de la littérature

Dans ce travail, un modèle d'oxydation du butan-2-ol et de l'iso-butanol n'ayant pas été proposé, nous avons donc comparé nos résultats expérimentaux à ceux obtenus en utilisant un modèle de la littérature développé pour modéliser des délais d'auto-inflammation en tube à choc. Ainsi sont comparées sur les figures VI-17 à VI-24 les prédictions du modèle de Moss *et al* [12] et les résultats expérimentaux dans nos conditions d'étude.

Dans le cas de l'oxydation du butan-2-ol (figures VI-17 à VI-20) on peut voir que le modèle se montre trop réactif, entraînant une surestimation de la plupart des espèces : hydrogène, éthylène, méthane, formaldéhyde, acétaldéhyde, dioxyde de carbone.

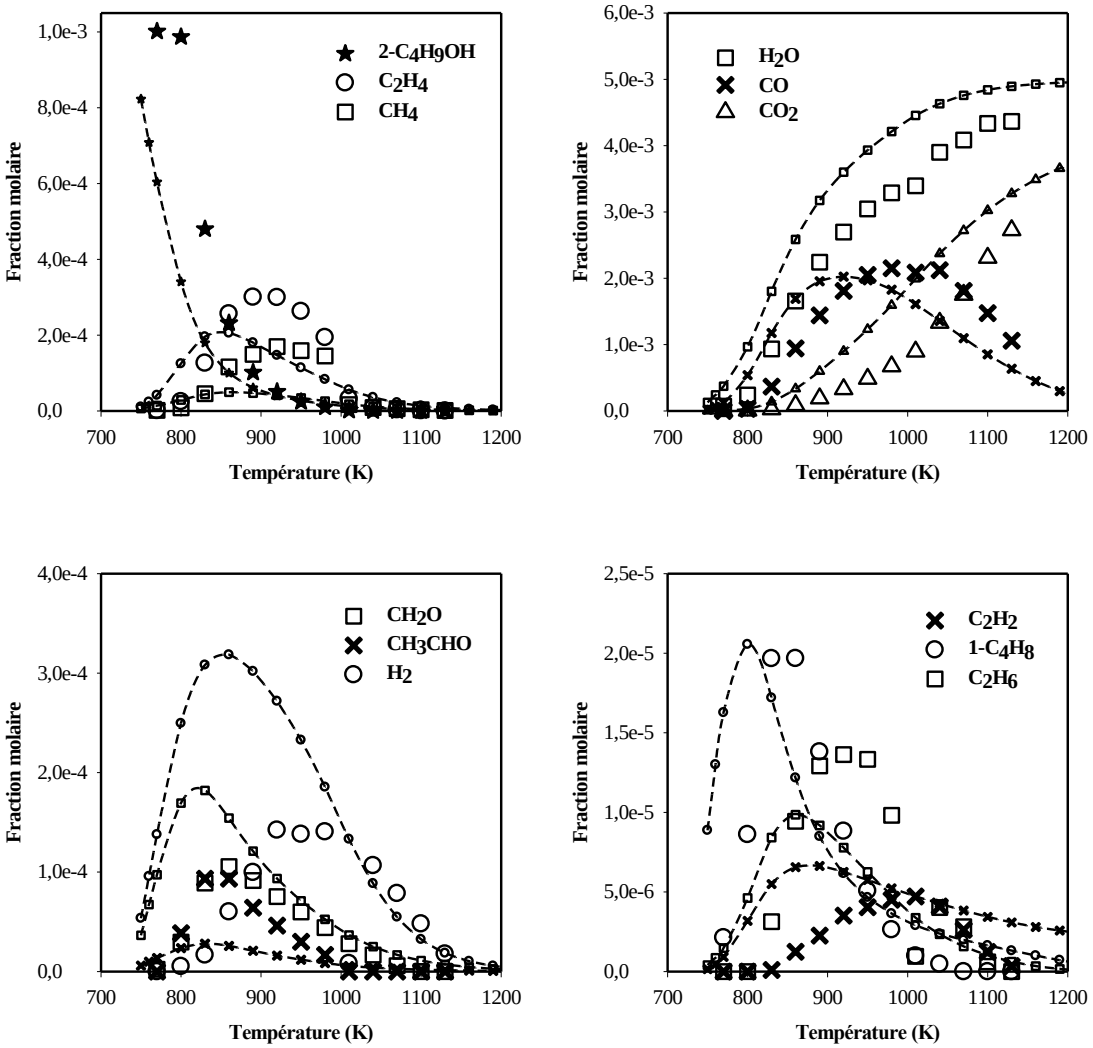


Figure VI-17 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss *et al* [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation du butan-2-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de 2-C_4H_9OH, φ=0,5 ; τ=0,7 s

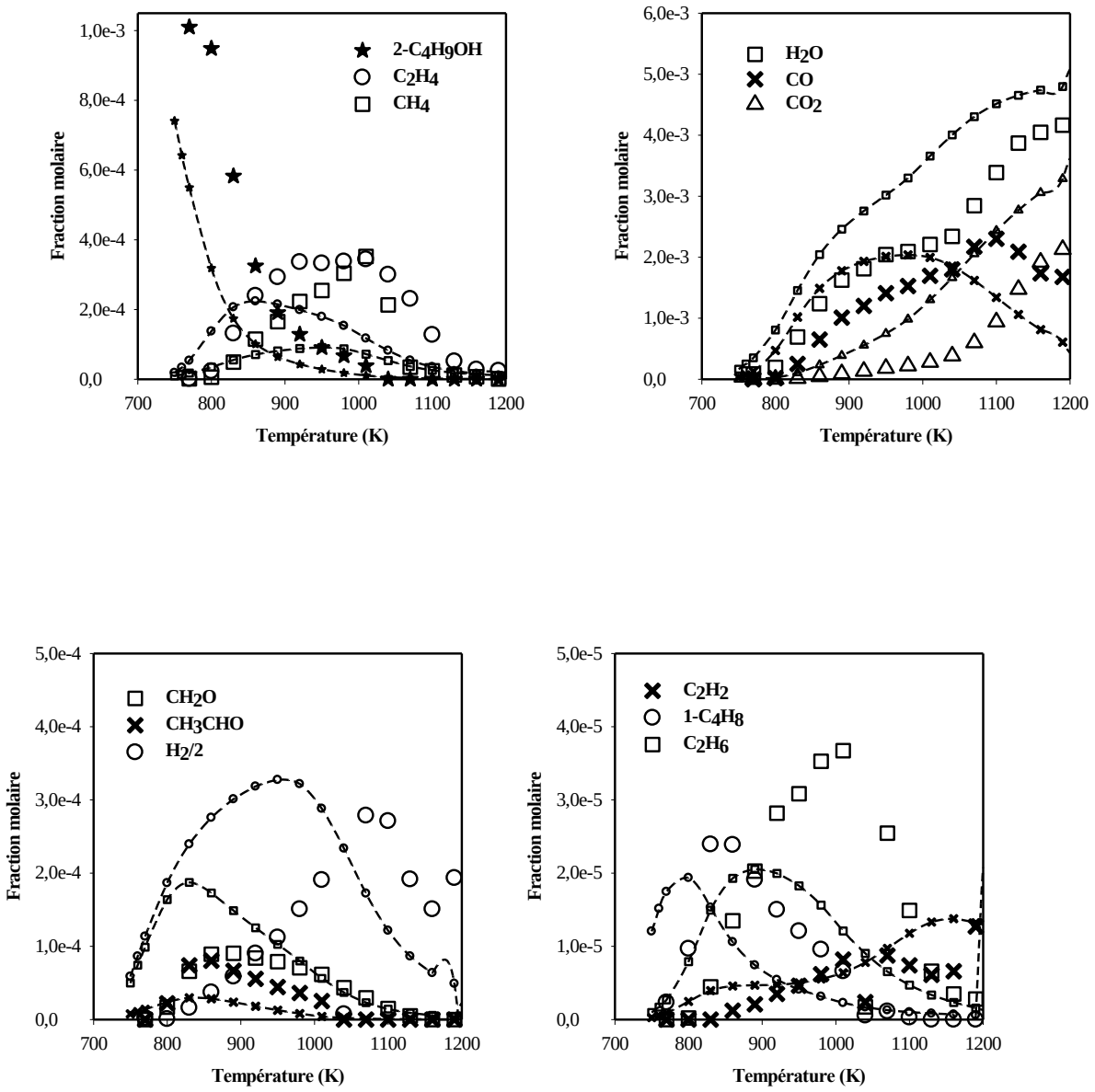


Figure VI-18 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation du butan-2-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de 2-C_4H_9OH, φ=1 ; τ=0,7 s

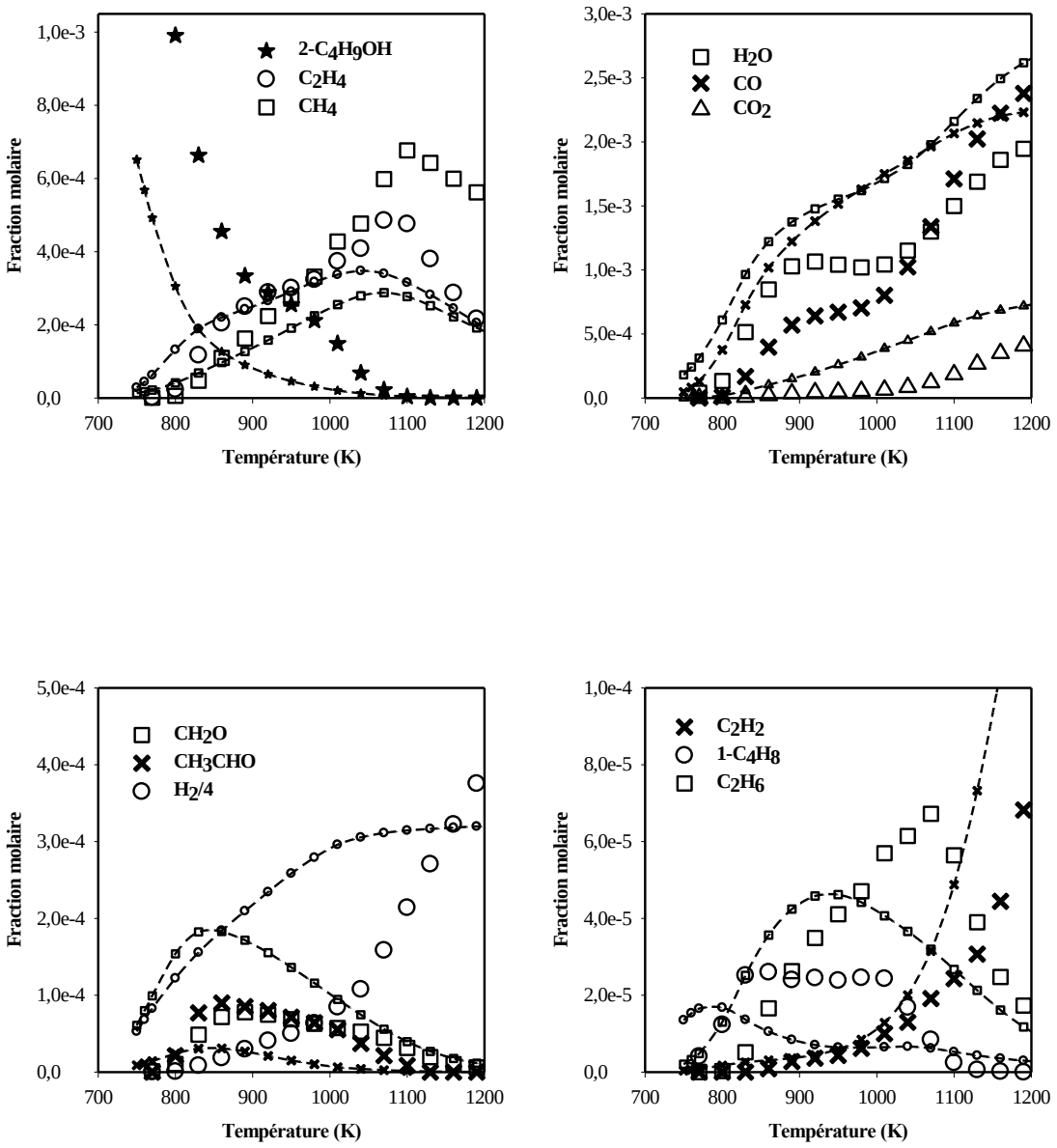


Figure VI-19 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation du butan-2-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de 2-C_4H_9OH, φ=2 ; τ=0,7 s

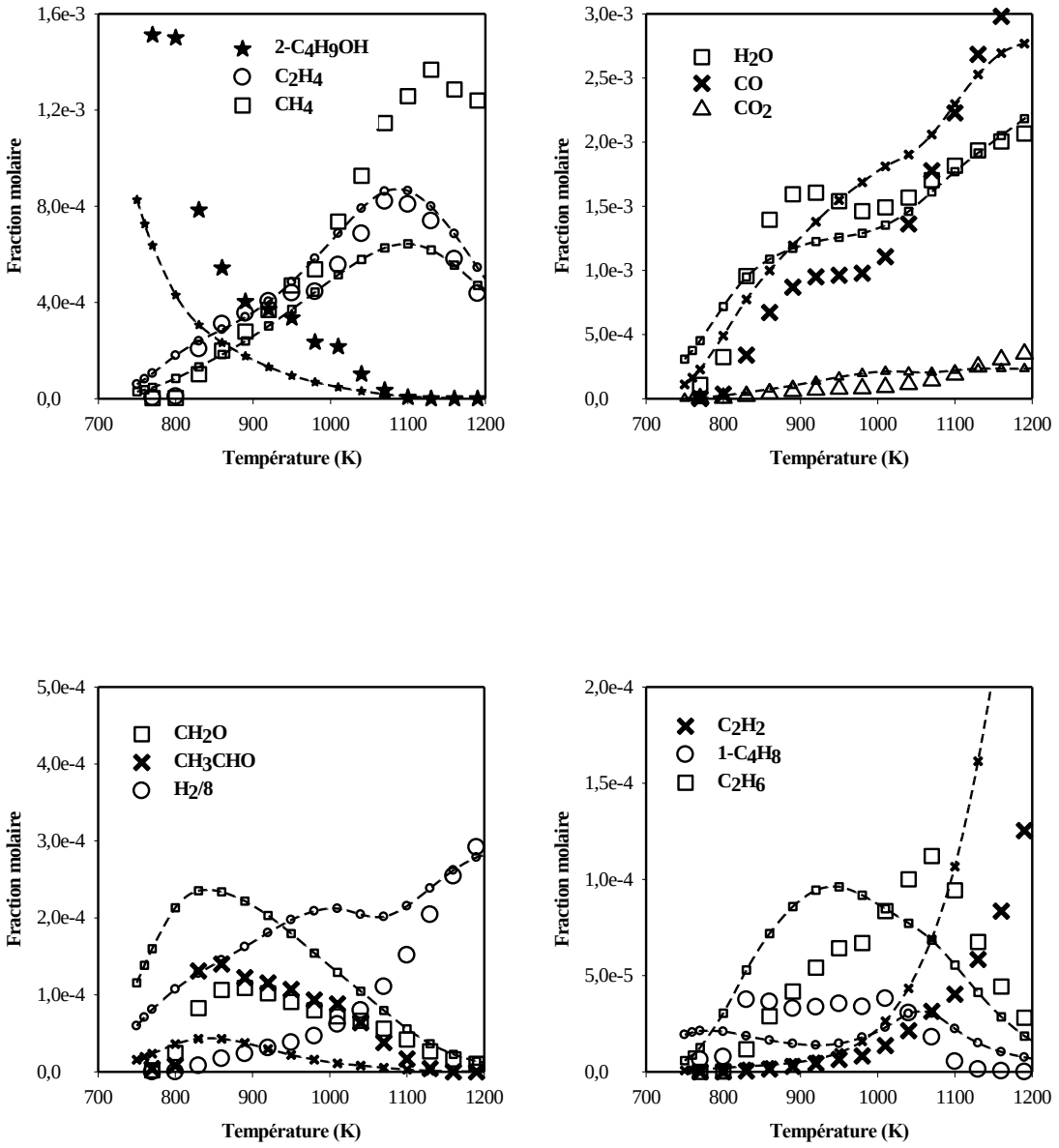


Figure VI-20 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation du butan-2-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de 2-C_4H_9OH, φ=4 ; τ=0,7 s

Dans le cas de l'oxydation de l'iso-butanol (figure VI-21 à VI-24), on constate que l'accord entre le modèle de Moss et al. et nos expériences est acceptable même si certaines espèces (CH_2O, CH_3CHO, H_2) sont encore surestimées.

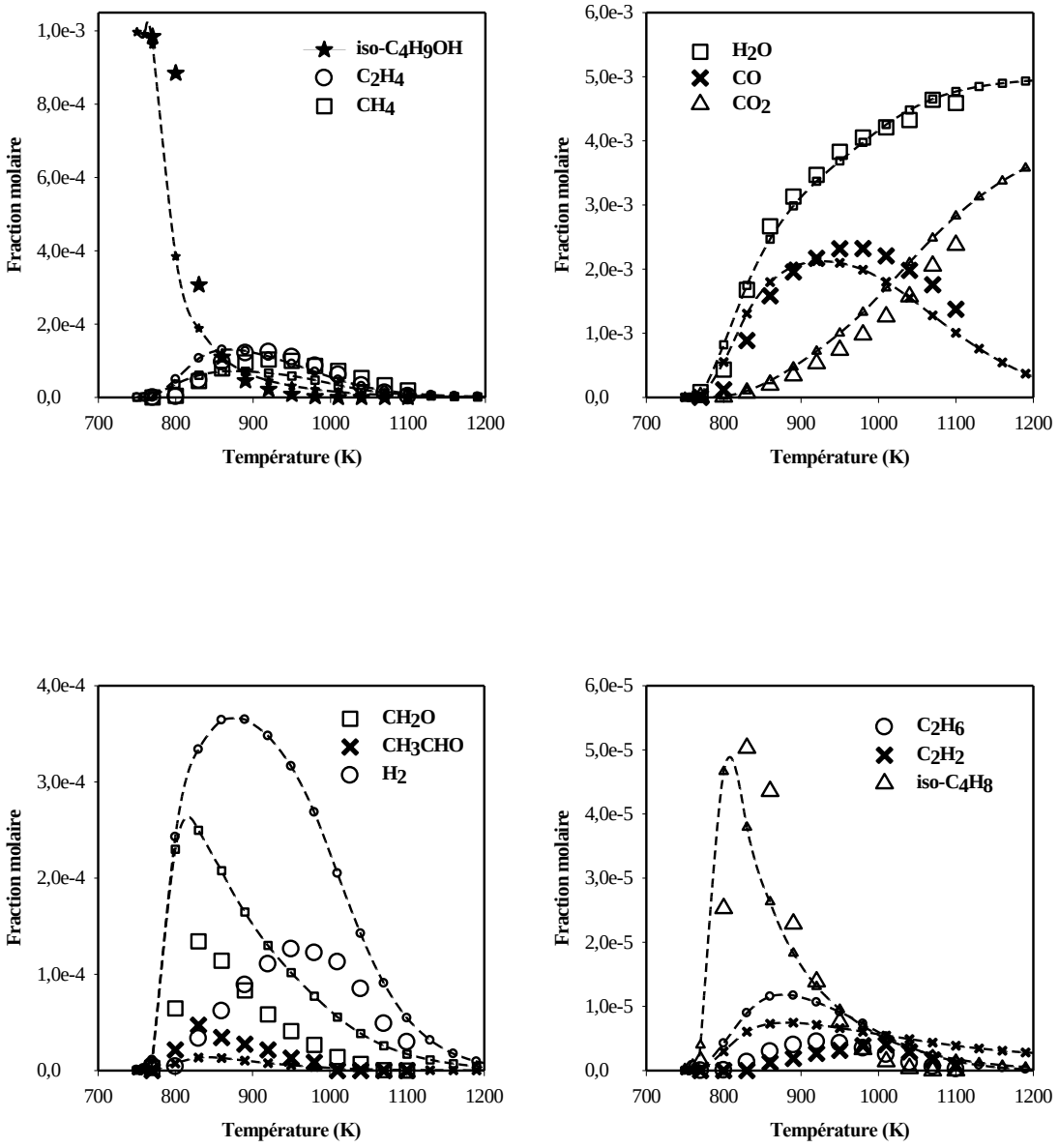


Figure VI-21 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation de iso-butanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de iso-C_4H_9OH, φ=0,5 ; τ=0,7 s

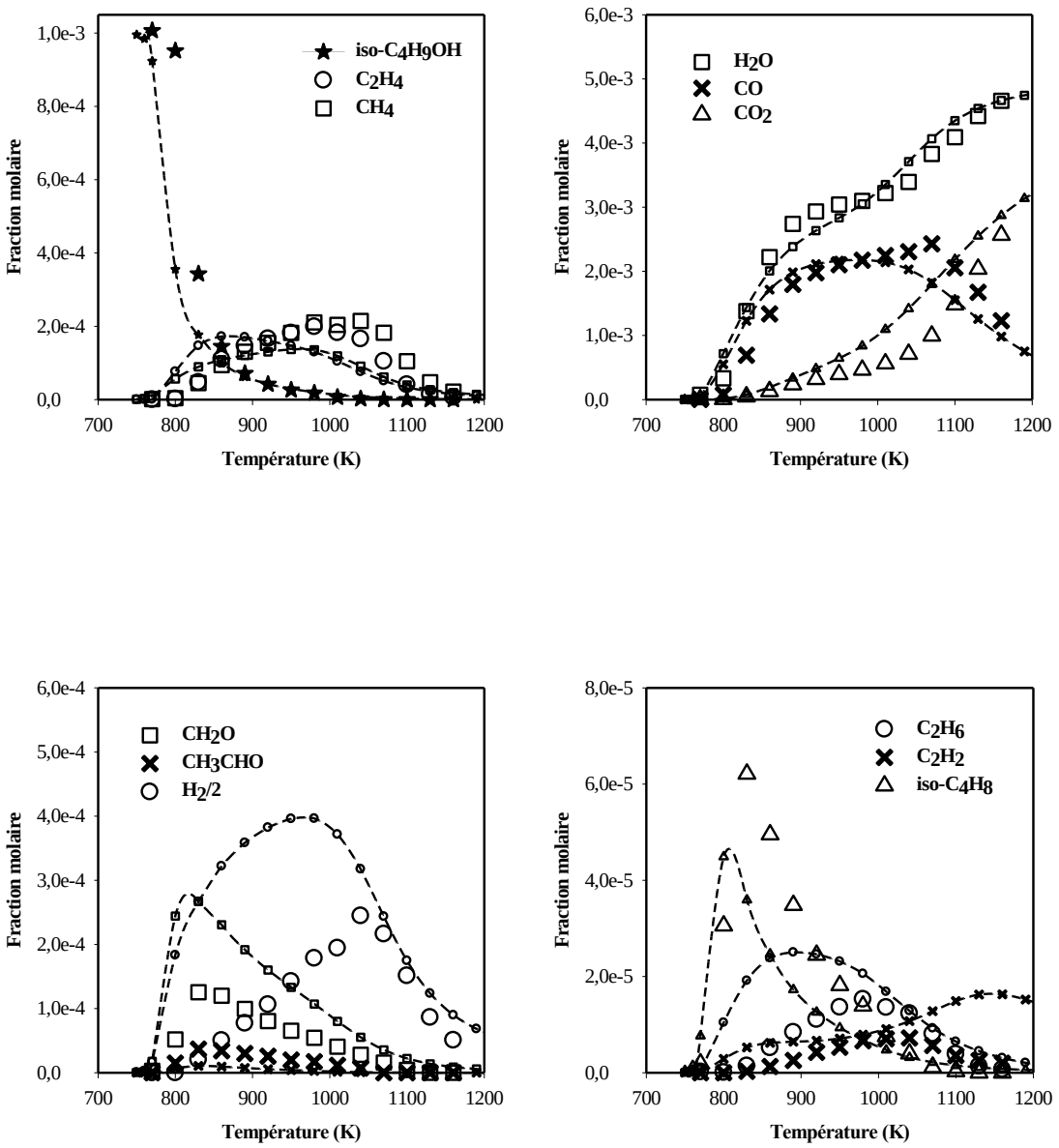


Figure VI-22 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation de iso-butanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de iso-C_4H_9OH, φ=1 ; τ=0,7 s

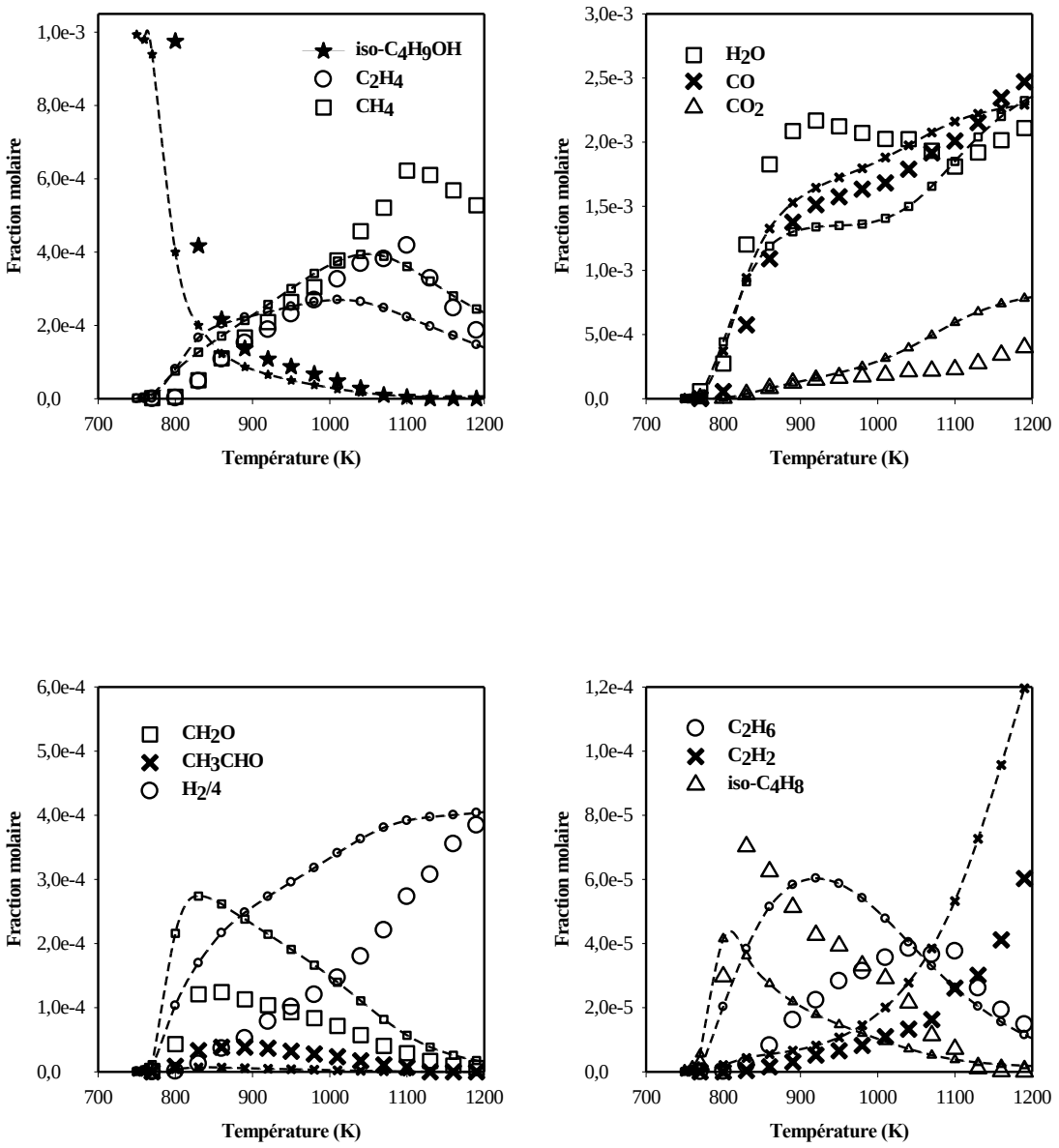


Figure VI-23 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation de iso-butanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de iso-C_4H_9OH, φ=2 ; τ=0,7 s

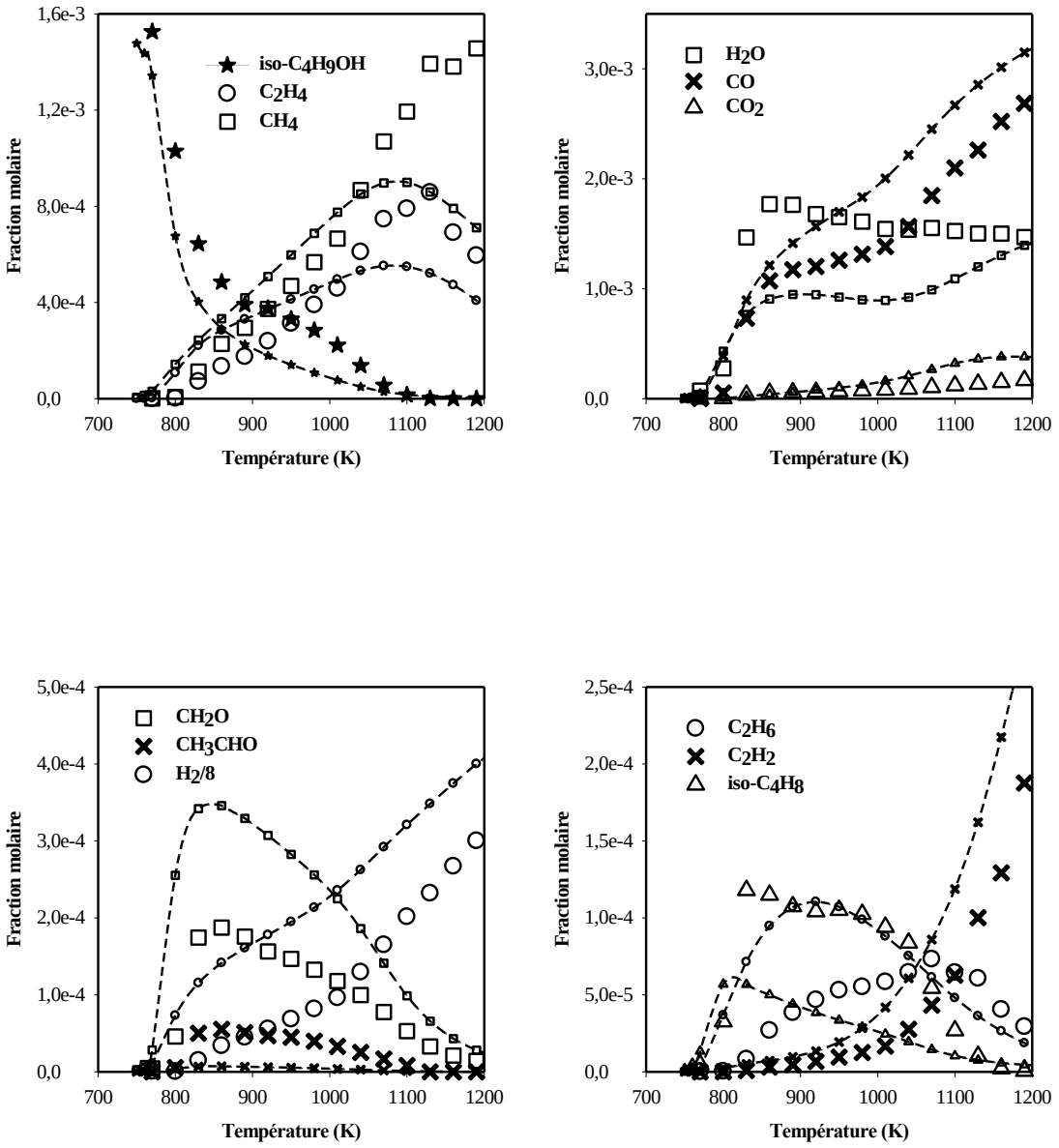


Figure VI-24 : Confrontation modèle (tirets et petits symboles : modèle de Moss et al [12])-expérience (grands symboles : cette étude) : oxydation de iso-butanol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de iso-C_4H_9OH, φ=4 ; τ=0,7 s

1.4. Oxydation du pentan-1-ol

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du pentan-1-ol a été étudiée en réacteur auto-agité dans les conditions expérimentales résumées dans le tableau VI-6.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Pentan-1-ol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$21{,}40.10^{-3}$	$9{,}776.10^{-1}$	0,35	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$15{,}00.10^{-3}$	$9{,}840.10^{-1}$	0,5	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$7{,}50.10^{-3}$	$9{,}915.10^{-1}$	1	770-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}75.10^{-3}$	$9{,}953.10^{-1}$	2	770-1100
10	0,7	$1{,}5.10^{-3}$	$2{,}80.10^{-3}$	$9{,}957.10^{-1}$	4	770-1160

Tableau VI-6 : Oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Les expériences réalisées en réacteur auto-agité concernant l'oxydation du pentan-1-ol ont permis d'obtenir des profils de fractions molaires en fonction de la température des réactifs, des produits et des espèces intermédiaires principales. Ces profils (grands symboles) sont représentés sur les figures VI-25 à VI-29.

Les composés identifiés principalement lors de l'oxydation du pentan-1-ol sont l'hydrogène, le monoxyde de carbone, le dioxyde de carbone, le formaldéhyde, le méthane, l'éthylène, l'éthane, l'acétylène, le propène, l'acétaldéhyde, le propanal, l'acroléine et le pentanal.

c) Confrontation modèle-expérience

Les simulations réalisées avec le mécanisme d'oxydation proposé ont été confrontées à nos résultats expérimentaux. Cette confrontation est présentée sur les figures VI-25 à VI-29 où les résultats des simulations sont signifiés par les lignes et les petits symboles et les résultats expérimentaux par les grands symboles. Il apparaît que le modèle reproduit bien le profil du pentan-1-ol, mais sous-estime légèrement la réactivité en milieux riches.

Les quantités de dioxyde de carbone, de monoxyde de carbone, de méthane et d'éthylène sont bien reproduites en milieu pauvre (φ=0,35 et 0,5). Par contre, à la stœchiométrie et en milieu riche, le modèle sous-estime les quantités d'éthylène et de propène. Cette sous-estimation de l'éthylène et du propène est de plus en plus importante avec l'augmentation de la richesse.

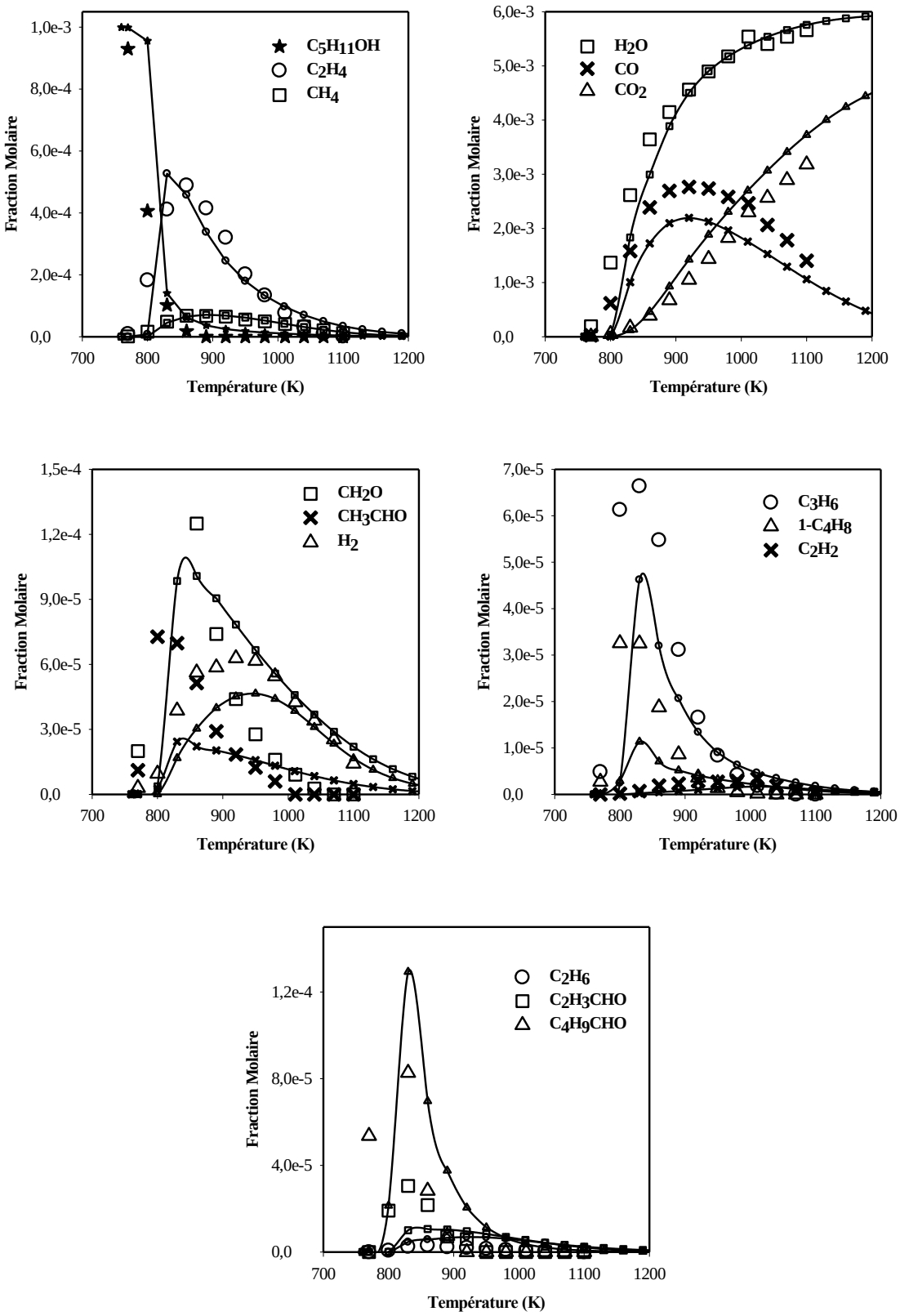


Figure VI-25 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_5H_{11}OH$, φ=0,35, τ=0,7 s

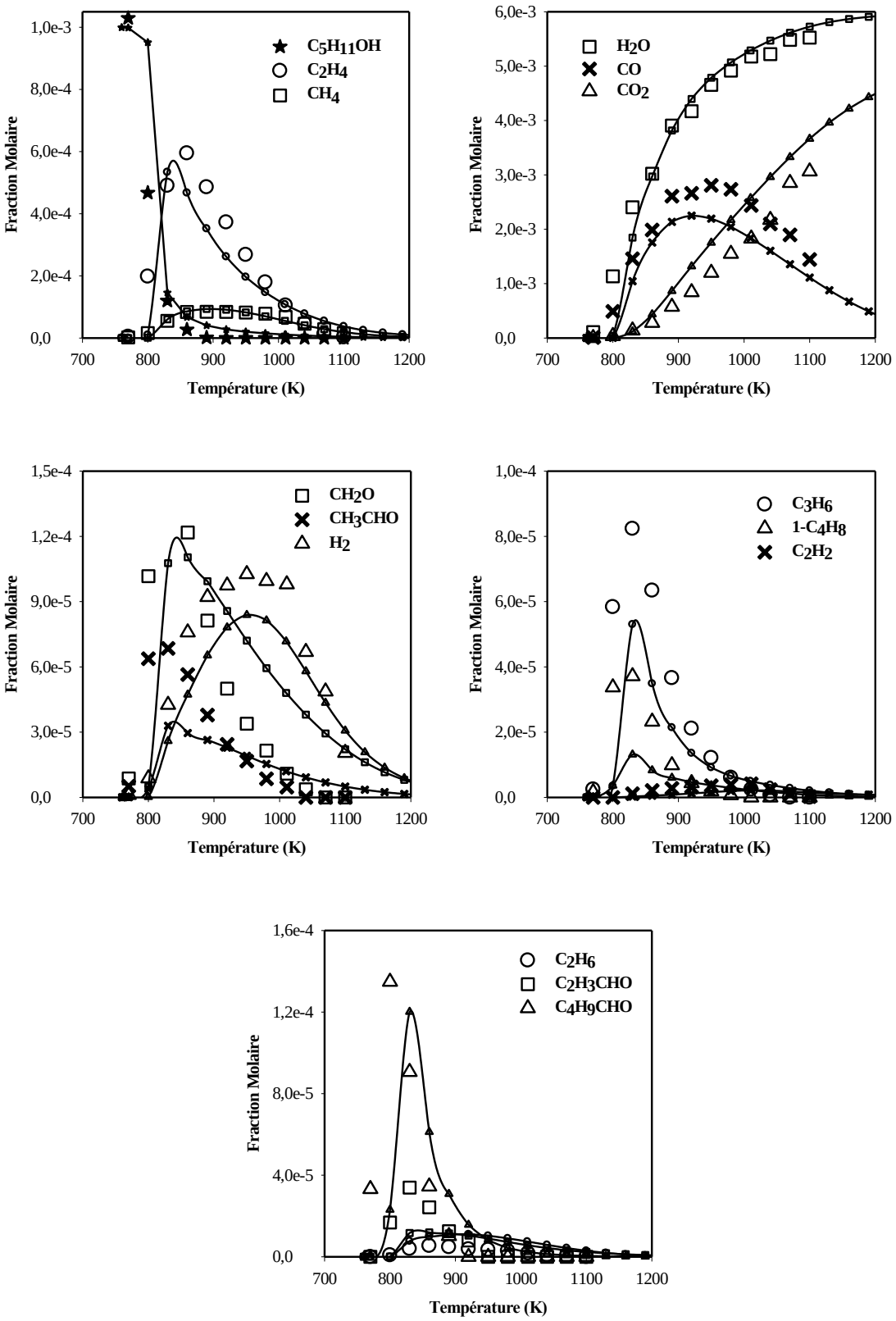


Figure VI-26 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_5H_{11}OH$, φ=0,5, τ=0,7 s

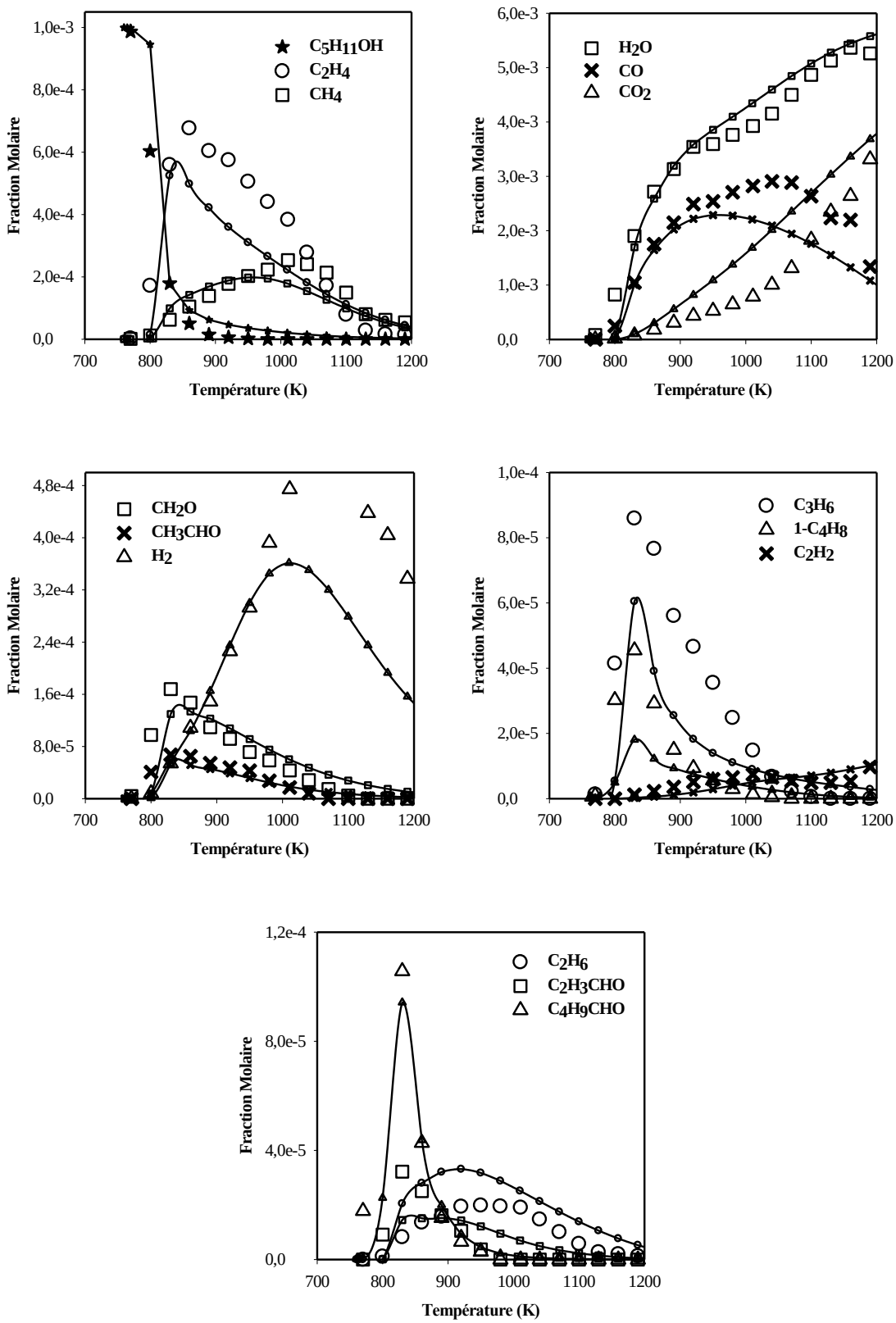


Figure VI-27 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_5H_{11}OH$, φ=1, τ=0,7 s

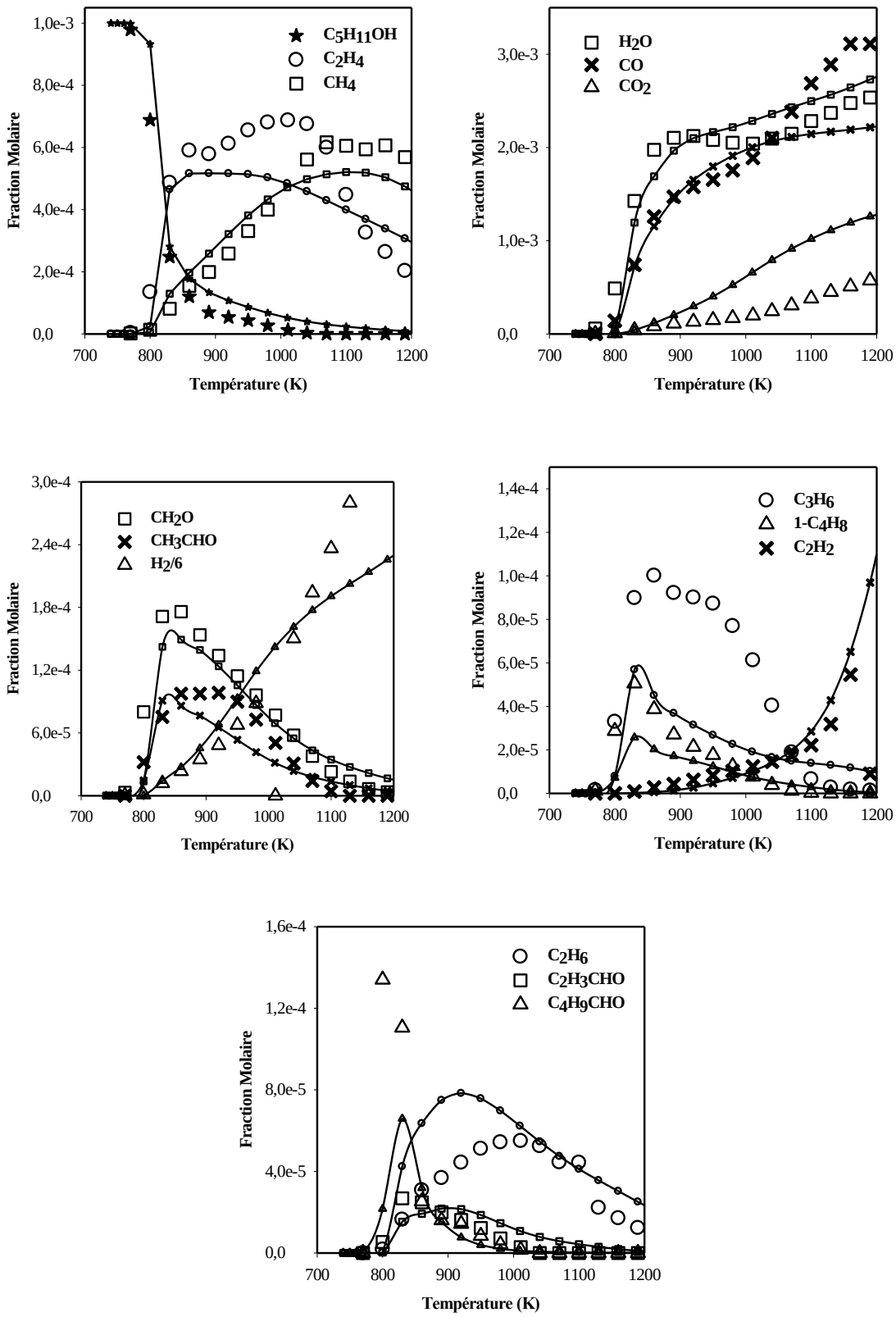


Figure VI-28 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_5H_{11}OH$, φ=2, τ=0,7 s

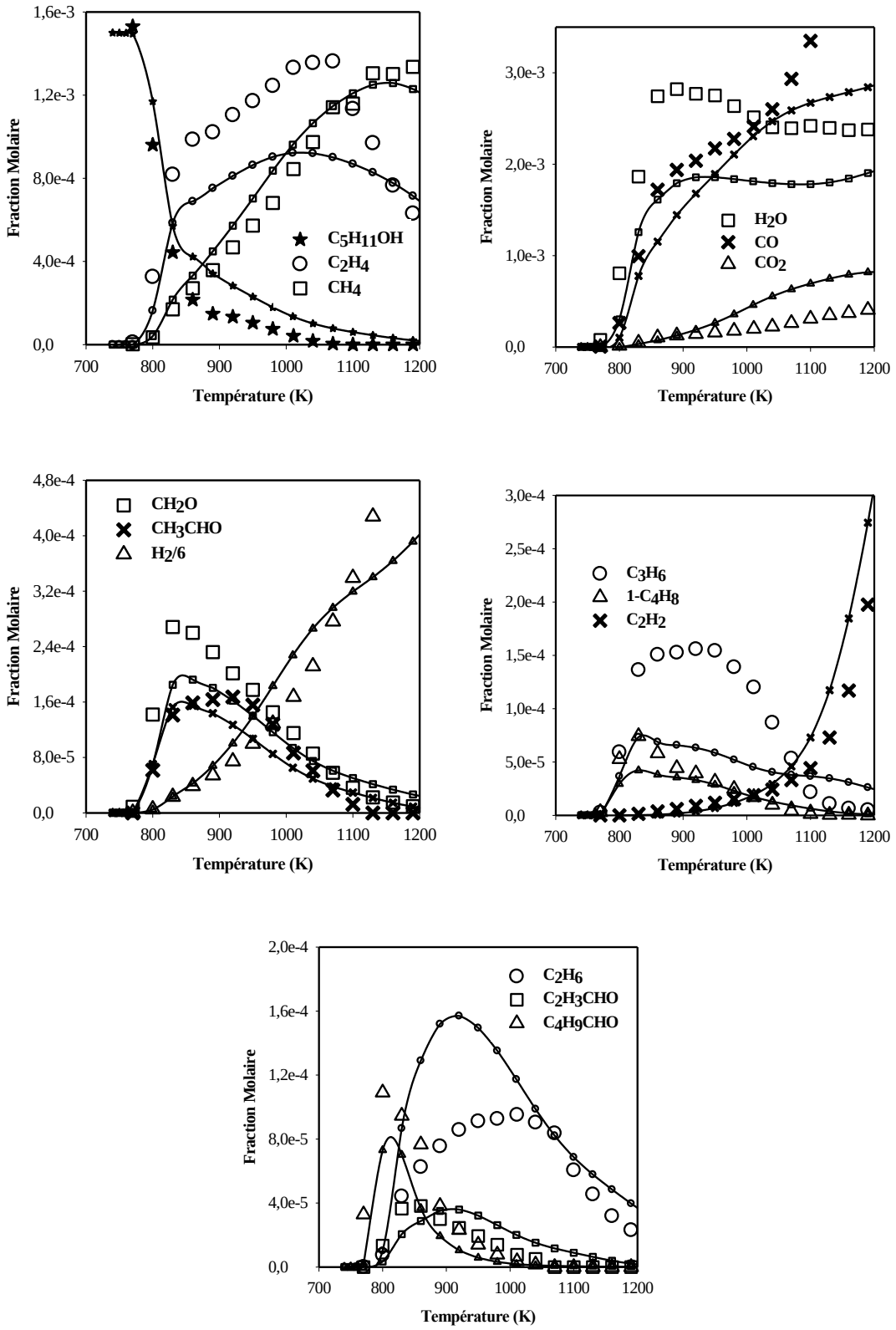


Figure VI-29 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du pentan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1500 ppm de $C_5H_{11}OH$, φ=4, τ=0,7 s

➢ Analyse de voies réactionnelles

La figure VI-30 présente un schéma illustrant les voies de consommation du pentan-1-ol déduite de l'analyse de vitesse réalisée à la stœchiométrie (φ=1), à haute pression (10 atm) et une température de 890 K.

A cette température, la principale voie de consommation du pentan-1-ol passe par la formation des radicaux pentanoyle par réaction de métathèse avec le radical OH. Ces radicaux pentanoyle se décomposent ensuite pour former des alcènes et d'autres radicaux. Par ailleurs, ils peuvent s'isomériser également : ces réactions d'isomérisations redistribuent les produits (radicaux pentanoyle) entre les différents isomères radicalaires, qui se décomposent ensuite.

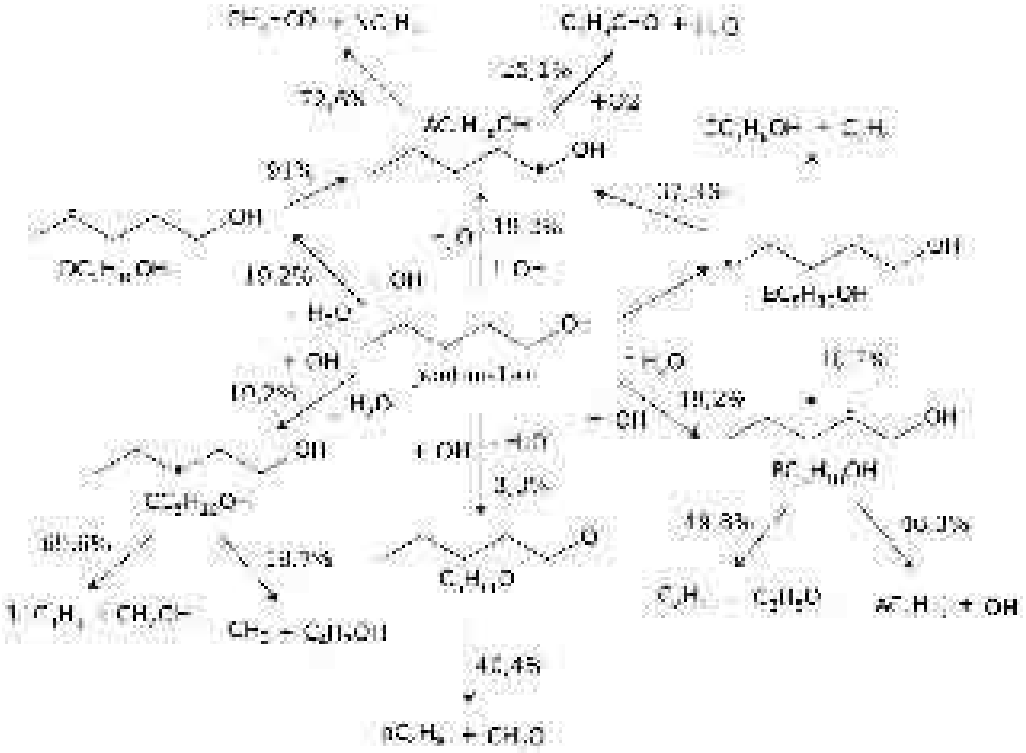


Figure VI-30 : Voies de dégradation principales lors de l'oxydation du pentan-1-ol en réacteur-agité à T= 890 K

➢ Analyse de sensibilité

Nous avons effectué une analyse de sensibilité afin de déterminer les réactions les plus influentes sur la consommation du pentan-1-ol. Les résultats de cette analyse sont présentés sur la figure VI-31.

Les réactions de métathèses avec le radical OH ont un effet important sur la consommation du pentan-1-ol. Ces réactions de métathèses donnent les principaux radicaux cités dans la partie précédente. Les réactions des espèces de petites tailles ($H + O \rightleftarrows OH + O$, $H + O_2 + M \rightleftarrows HO_2 + M$, $HO_2 + OH \rightleftarrows H_2O + O_2$, $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_3O + OH$, $CH_2O + HO_2 \rightleftarrows HCO + H_2O_2$) sont également importantes car elle produisent des radicaux qui favorisent cette consommation de l'hydrocarbure

initial, à savoir le pentan-1-ol. Parmi les réactions présentant un coefficient de sensibilité positif, il y a les réactions $HO_2 + OH \rightleftarrows H_2O + O_2$, $AC_5H_{10}OH \rightleftarrows CH_3HCO + NC_3H_7$ et $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$: leur effet permet une baisse globale de la réactivité. En effet, la première transforme 2 radicaux, dont un très réactif, en 2 molécules stables. La deuxième réaction produit des radicaux CH_3HCO et NC_3H_7 qui vont réagir en consommant les radicaux OH et HO2. Enfin la troisième réaction ($CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$) consomme également des radicaux OH très réactifs.

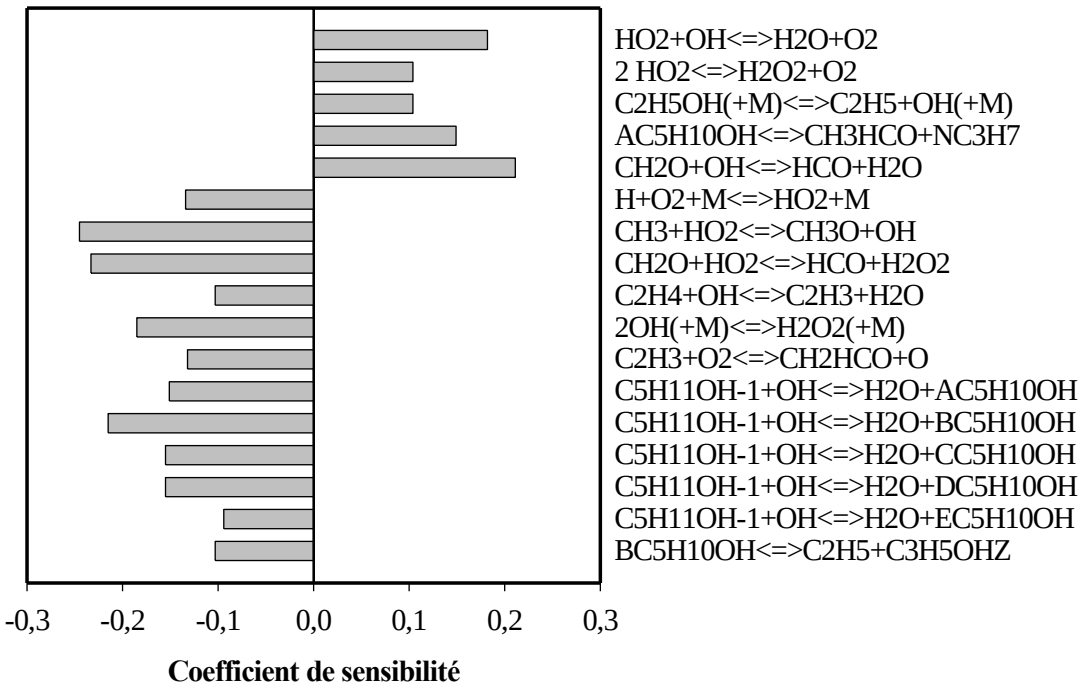


Figure VI-31 : Coefficient de sensibilité pour le pentan-1-ol lors de son oxydation en réacteur-agité à T=950 K, à 10 atm et φ=1

1.1. Oxydation du hexan-1-ol

a) Conditions expérimentales

L'oxydation du hexan-1-ol a été étudiée à 10 atm dans un large domaine de température et de richesse. Les conditions d'étude sont résumées dans le tableau VI-7.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{hexan-1-ol}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$18{,}00.10^{-3}$	$9{,}810.10^{-1}$	0,5	560-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$4{,}50.10^{-3}$	$9{,}945.10^{-1}$	1	560-1100
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}38.10^{-3}$	$9{,}956.10^{-1}$	2	560-1190
10	0,7	$1{,}5.10^{-3}$	$3{,}38.10^{-3}$	$9{,}951.10^{-1}$	4	560-1190

Tableau VI-7 : Oxydation du hexan-1-ol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Description des résultats expérimentaux

Nous avons obtenu pour des richesses allant de 0,5 à 4 les profils de concentration des réactifs, produits et principaux composés intermédiaires. Ces profils (grands symboles) sont représentés sur les figures VI-32 à VI-35.

Les espèces intermédiaires principales sont le monoxyde de carbone, l'éthylène, le méthane, le formaldéhyde, l'acétaldéhyde, l'hydrogène, le propène, le but-1-ène, le pent-1-ène,

On constate que le hexan-1-ol réagit à basse température entre 590 et 700 K pour φ=0,5. Cette réactivité à basse température est beaucoup moins visible pour les autres richesses.

c) Confrontation modèle-expérience

Sur les figures VI-32 à VI-35, sont également tracés les profils simulés des espèces détectées lors de l'oxydation du hexan-1-ol. Le modèle reproduit convenablement l'oxydation du hexan-1-ol dans les conditions d'études sauf en milieux riches (φ=2 et φ=4) où il a tendance à sous-estimer légèrement la réactivité après 900 K.

En milieu pauvre (φ=0,5), le modèle reproduit assez bien les profils des espèces, mais il surestime la concentration du formaldéhyde la flamme froide. D'autre part, la concentration d'acétaldéhyde est sous-estimée par le modèle entre 800 et 900 K.

A la stœchiométrie, on observe globalement un accord satisfaisant entre les profils simulés et expérimentaux même si, la concentration maximale de l'hydrogène prévue par le modèle est légèrement plus élevée que ce nous donne l'expérience.

En milieu riche, les résultats de la simulation pour l'hydrogène sont plus satisfaisants. Par contre, le modèle sous-estime les concentrations de H_2O et du propène (surtout à φ=4) dans la zone de haute température.

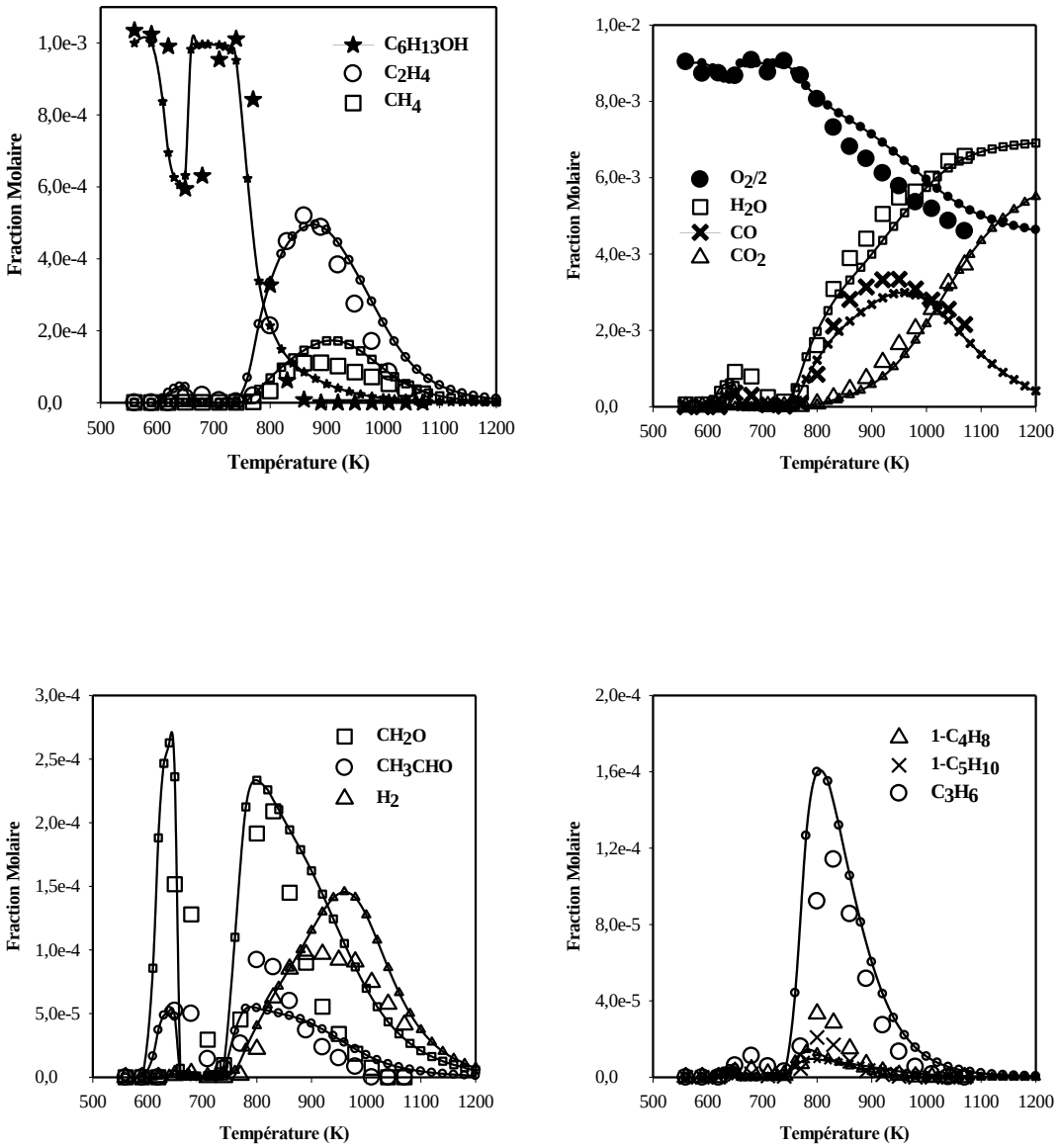


Figure VI-32 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_6H_{13}OH$, φ=0,5 et τ=0,7 s

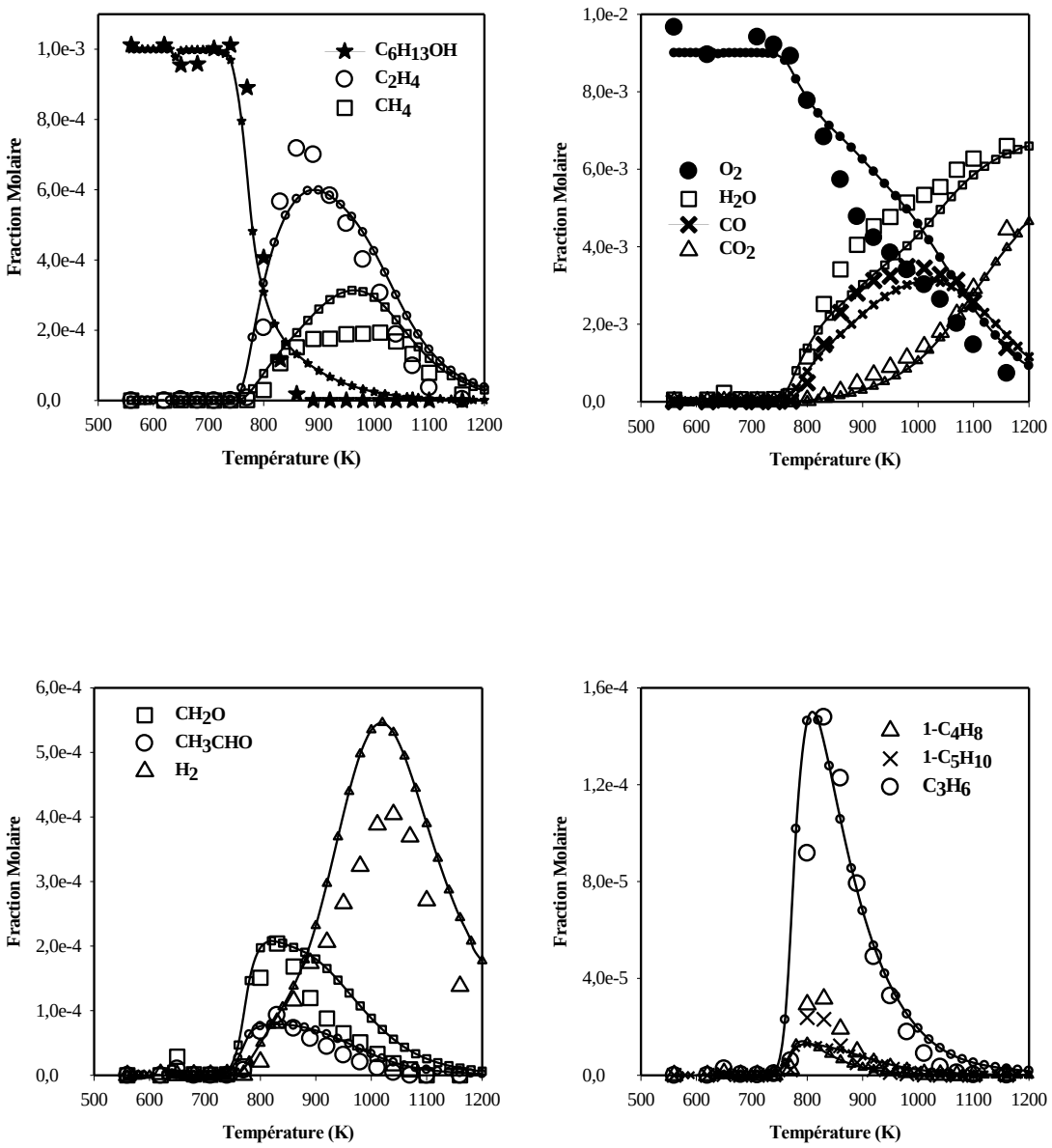


Figure VI-33 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_6H_{13}OH$, φ=1,0, τ=0,7 s

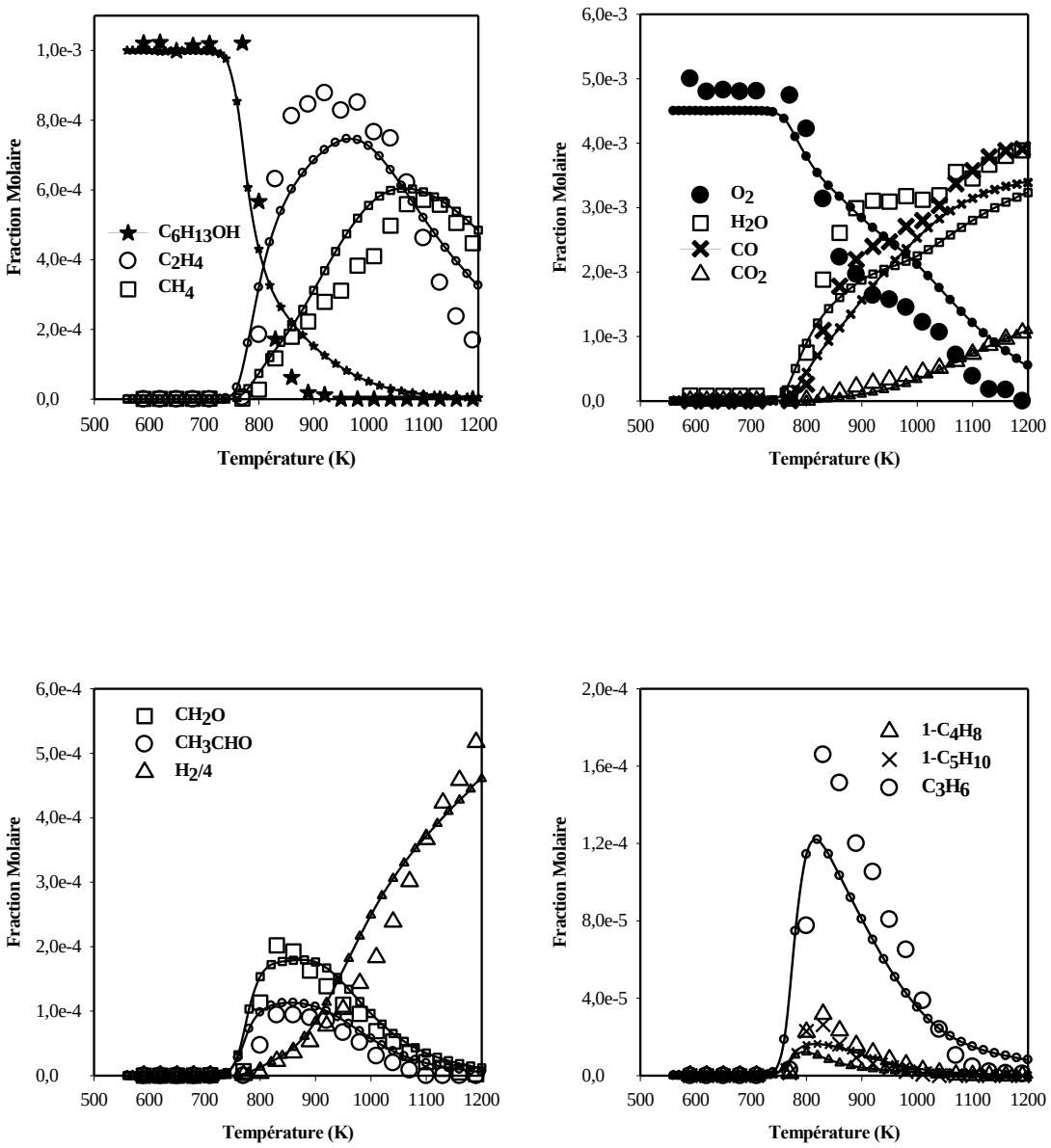


Figure VI-34 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm de $C_6H_{13}OH$, φ=2 et τ=0,7 s

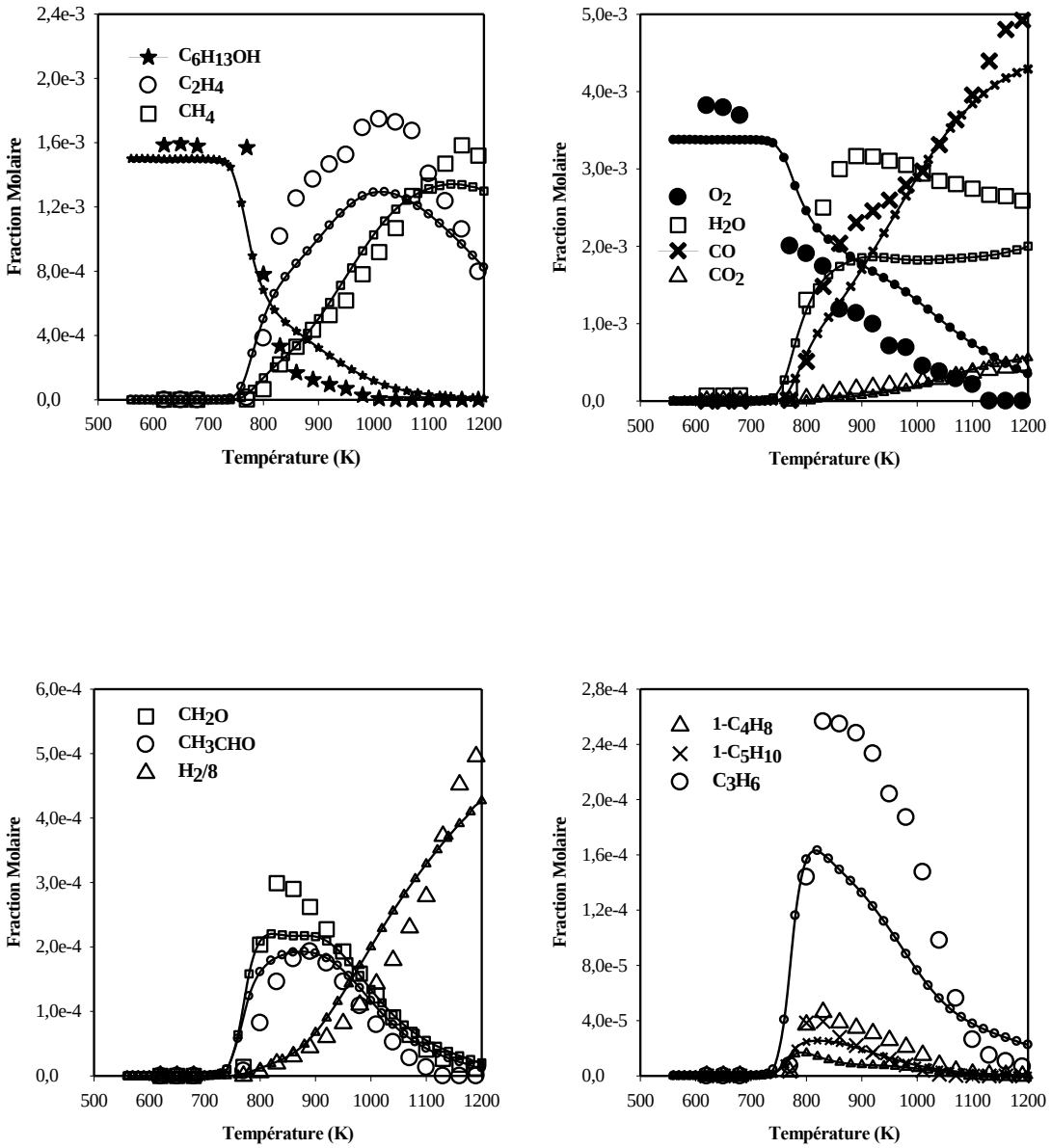


Figure VI-35 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur auto-agité à 10 atm : 1500 ppm de $C_6H_{13}OH$, φ=4 et τ=0,7 s

- Analyse de voies réactionnelles

Maintenant que nous avons vu que le modèle reproduit de manière convenable l'oxydation du hexan-1-ol en réacteur auto-agité, nous avons effectué une analyse de voies réactionnelles. Les figures VI-36 et VI-37 présentent des voies de décomposition du hexan-1-ol à richesse 0,5 respectivement à 650 K et 950 K.

Sur la figure VI-36 (φ=0,5 et T=650 K), on peut voir que l'hexan-1-ol réagit exclusivement par des réactions de métathèse avec le radical OH pour former les radicaux hexanoyles. Par la suite, ces radicaux peuvent réagir selon 3 voies différentes. Ils peuvent additionner l'oxygène pour former des radicaux peroxy. L'importance de cette voie est variable mais peut représenter jusqu'à 86 % de la consommation du radical (cf. figure VI-36). La deuxième voie est celle aboutissant à la formation des espèces insaturées (15 %), qui a lieu par une réaction d'oxydation. Enfin, les réactions d'isomérisation redistribuent les différents radicaux hexanoyles entres eux. Cependant une faible proportion des radicaux réagissent par cette voie.

Les radicaux peroxy vont a leur s'isomériser pour former des radicaux hydroperoxy qui connaîtront de nouvelles réactions d'isomérisation, ce qui permet de redistribuer les produits entre les différents isomères radicalaires. Ces radicaux hydroperoxy s décomposent ensuite pour former des éthers cycliques qui réagissent à leur tour par métathèse avec le radical OH pour donner des composés carbonylés et des radicaux alkyles.

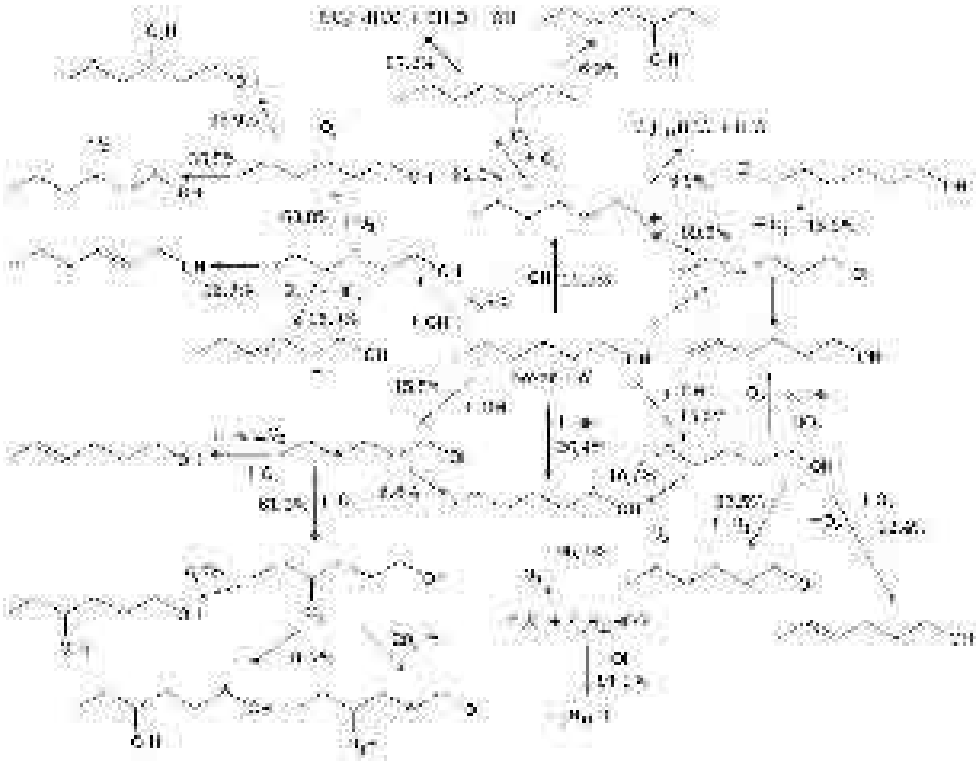


Figure VI-36 : Voies de dégradation principales lors de l'oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur-agité à T= 650 K

La figure VI-37 présente le schéma de dégradation du hexan-1-ol à 960 K et 10 atm. On peut voir que l'hexan-1-ol est toujours consommé par des réactions de métathèse avec le radical OH. A cette température, la voie de dégradation des radicaux a lieu exclusivement par une réaction de rupture de liaison C-C et C-O pour former des alcènes et des alcools insaturés. Avant cette réaction de décomposition, ces radicaux formés peuvent s'isomériser, ce qui permet la redistribution des différents isomères radicalaires.

Les alcènes vont à leur tour, réagir essentiellement par métathèse avec le radical OH pour former des radicaux allyliques qui vont également se décomposer par β-scission.

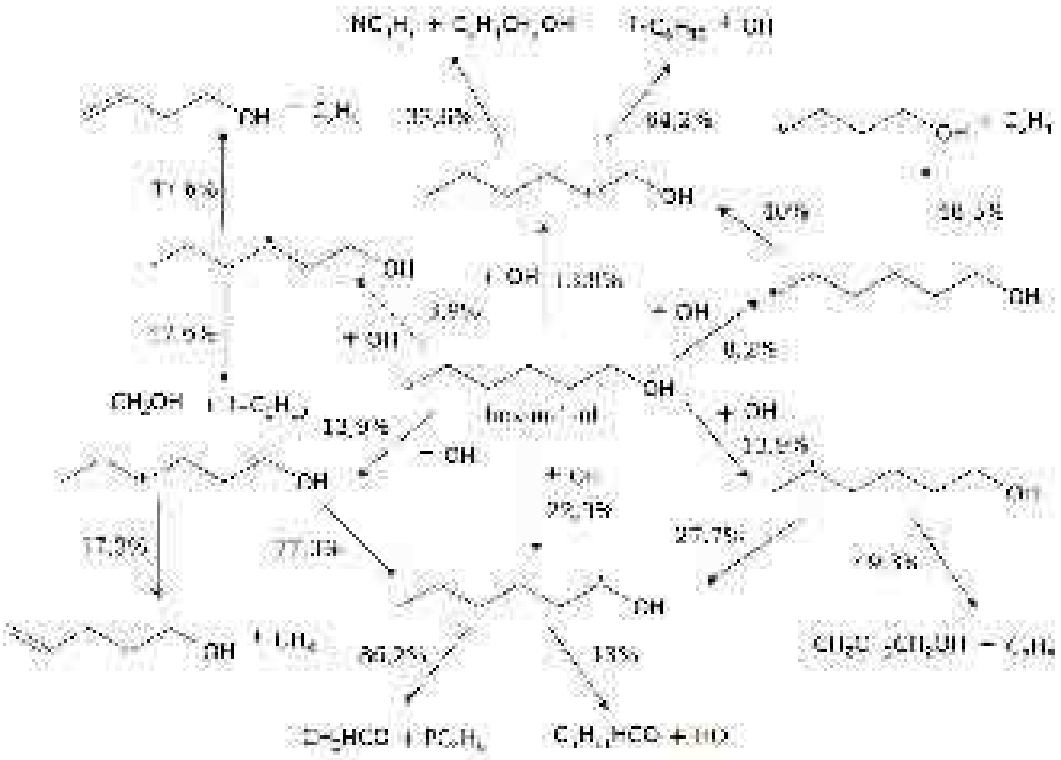


Figure VI-37 : Voies de dégradation principales lors de l'oxydation de l'hexan-1-ol en réacteur-agité à T= 960 K

➢ Analyse de sensibilité

Grâce au modèle, nous avons effectué deux analyses de sensibilité à faible richesse et haute pression. Nous avons ainsi déterminé les réactions auxquelles le profil de l'hexan-1-ol est le plus sensible. Les résultats de ces analyses sont présentés sur les figures VI-38 et VI-39 respectivement pour les températures 650 et 960 K.

Les réactions les plus influentes à T=650 K sont les réactions de métathèse du hexan-1-ol avec le radical OH. Ces réactions favorisent la consommation de l'hydrocarbure initial, à savoir le hexan-1-ol alors que les réactions d'oxydation tendent à ralentir cette consommation. Parallèlement l'effet

inhibiteur de la réaction $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$ plus marqué tend également à ralentir la consommation du hexan-1-ol car elle consomme des radicaux OH.

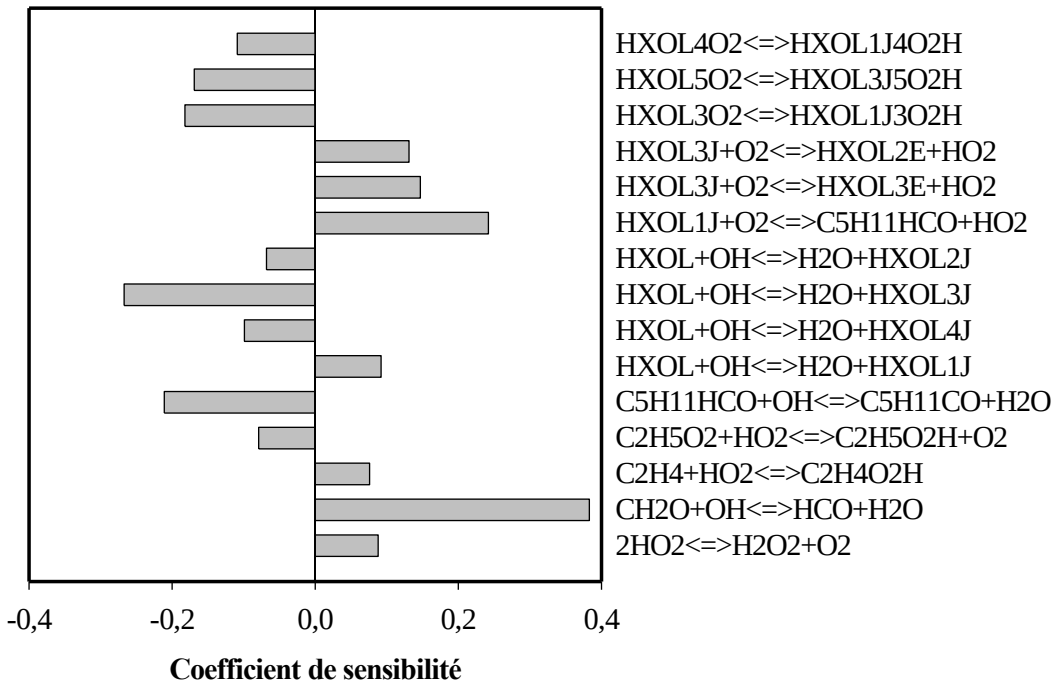


Figure VI-38 : Coefficient de sensibilité pour l'hexan-1-ol lors de son oxydation en réacteur-agité à T=650 K, à 10 atm et φ=1

A T=960 K, les réactions de métathèse avec le radical OH restent influentes et favorisent toujours la consommation de l'hexan-1-ol. Les réactions $CH_3 + HO_2 \rightleftarrows CH_3O + OH$ et $H + O2 \rightleftarrows OH + O$ produisent des radicaux OH très réactifs, ce qui favorise une augmentation de la réactivité du système. Par contre les réactions $CH_2O + OH \rightleftarrows HCO + H_2O$, $HO_2 + OH \rightleftarrows H_2O + O_2$, présentant un coefficient de sensibilité positif sont consommatrice des radicaux OH, ce qui entraîne une baisse de réactivité.

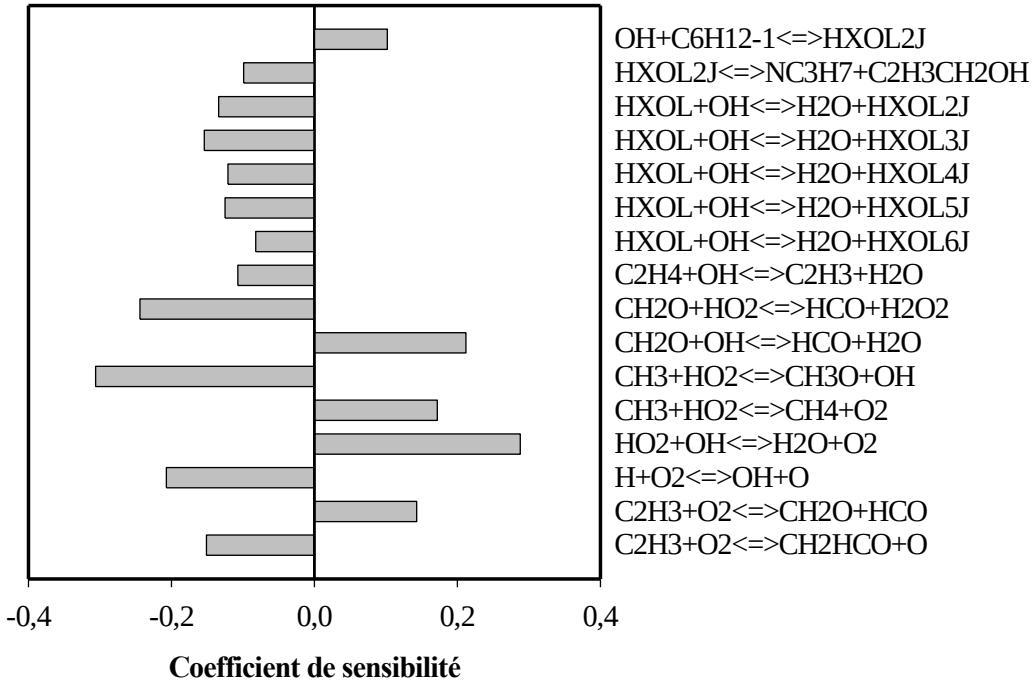


Figure VI-39 : Coefficient de sensibilité pour l'hexan-1-ol lors de son oxydation en réacteur-agité à T=960 K, à 10 atm et φ=1

2. Oxydation de quelques mélanges alcools-hydrocarbures

L'oxydation des hydrocarbures et composés oxygénés purs a fait objet de nombreuses études, tel que présenté dans une récente revue [13], alors que très peu d'études concernent des mélanges d'hydrocarbures ou des mélanges d'hydrocarbures oxygénés [14-17]. Par conséquent, l'obtention de données expérimentales est nécessaire pour proposer et valider des modèles cinétiques détaillés. A l'issu des travaux menés sur l'oxydation des composés purs, il nous a été semblé intéressant d'étudier l'oxydation de l'éthanol et du butan-1-ol en présence d'autres hydrocarbures non oxygénés. Les carburants commerciaux sont en effet constitués de plusieurs centaines de molécules regroupées en plusieurs familles chimiques (n-alcanes, iso-alcanes, aromatiques, cyclo-alcanes). Des carburants modèles ou surrogates [15, 18-22] ont été étudiés au laboratoire. Nous avons considéré des hydrocarbures représentatifs des carburants de type essence et avons ainsi étudié des mélanges alcools/hydrocarbures et alcools/essence. L'essence est représentée par un mélange isooctane/toluène/hex-1-ène, inspiré des travaux de Yahyaoui *et al.* [15].

2.1. Oxydation du mélange méthanol/essence

a) conditions expérimentales

Le mélange étudié (M85) est un mélange composé de 85 % en volume de méthanol et 15 % en volume d'essence. Nous avons choisi les mêmes molécules représentatives de l'essence telles que décrites dans les travaux de Yahyaoui [15]. Le tableau VI-8 présente les conditions de l'oxydation du mélange en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{M85} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$4{,}0.10^{-3}$	$22{,}301.10^{-3}$	$9{,}737.10^{-1}$	0,35	770-1200
10	0,7	$4{,}0.10^{-3}$	$13{,}013.10^{-3}$	$9{,}829.10^{-1}$	0,6	770-1200
10	0,7	$4{,}0.10^{-3}$	$7{,}808.10^{-3}$	$9{,}882.10^{-1}$	1	770-1200
10	0,7	$4{,}0.10^{-3}$	$3{,}904.10^{-3}$	$9{,}9210.10^{-1}$	2	770-1200

Tableau VI-8 : Oxydation du mélange M85 en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-40 à VI-43 présentent les résultats des simulations du mélange M85 pour les quatre richesses étudiées : 0,35 ; 0,6 ; 1 ; 2. Il apparaît que le modèle proposé, reproduit bien les profils des réactifs (CH_3OH, 1-C_6H_{12}, C_7H_8 et i-C_8H_{18}) et des principales espèces formées (H_2O, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_4, C_3H_6, i-C_4H_8, H_2).

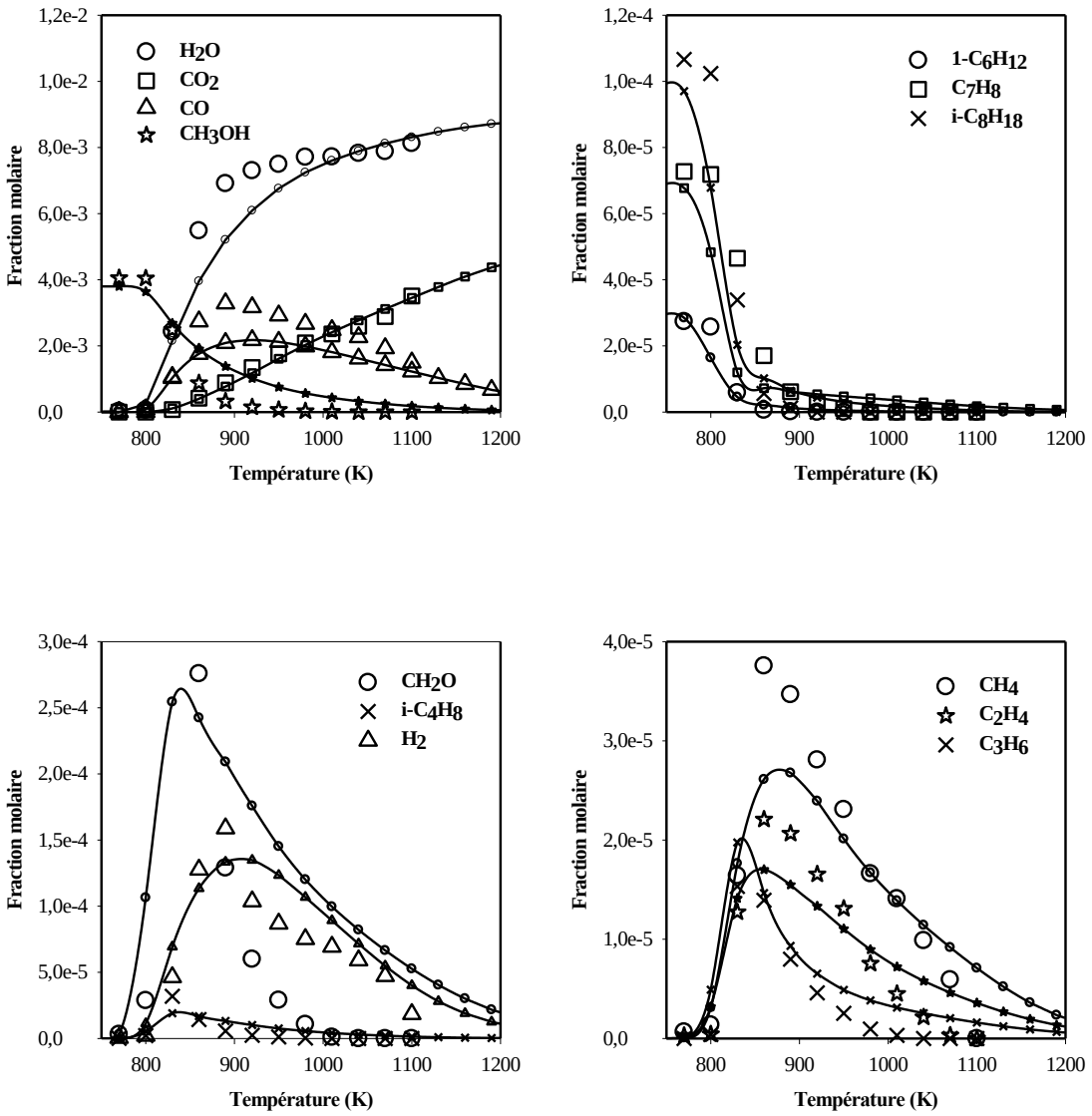


Figure VI-40 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange M85 en réacteur auto-agité à 10 atm : 4000 ppm de M85, φ=0,35 et τ=0,7 s

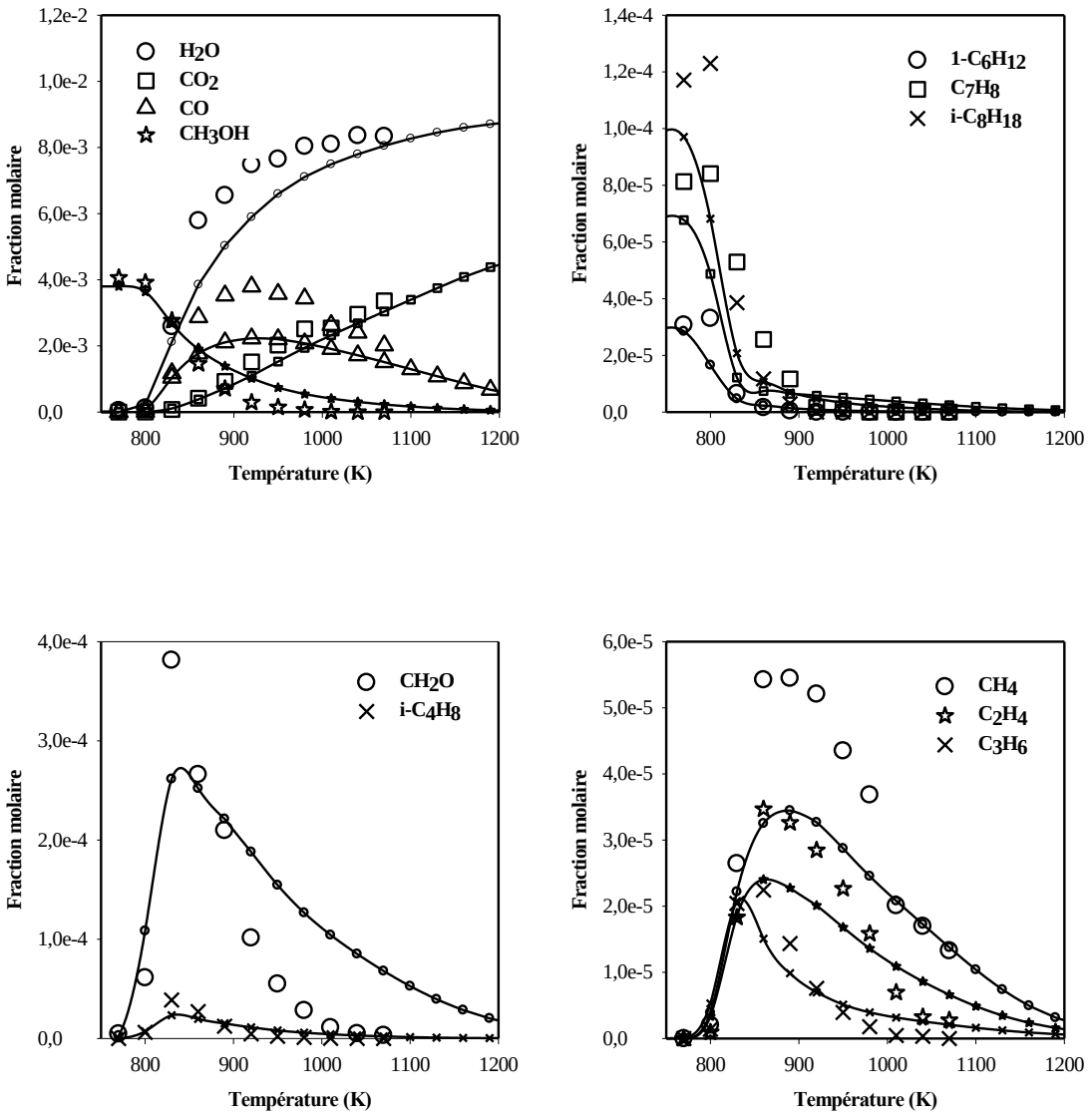


Figure VI-41 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange M85 en réacteur auto-agité à 10 atm : 4000 ppm de M85, φ=0,6 et τ=0,7 s

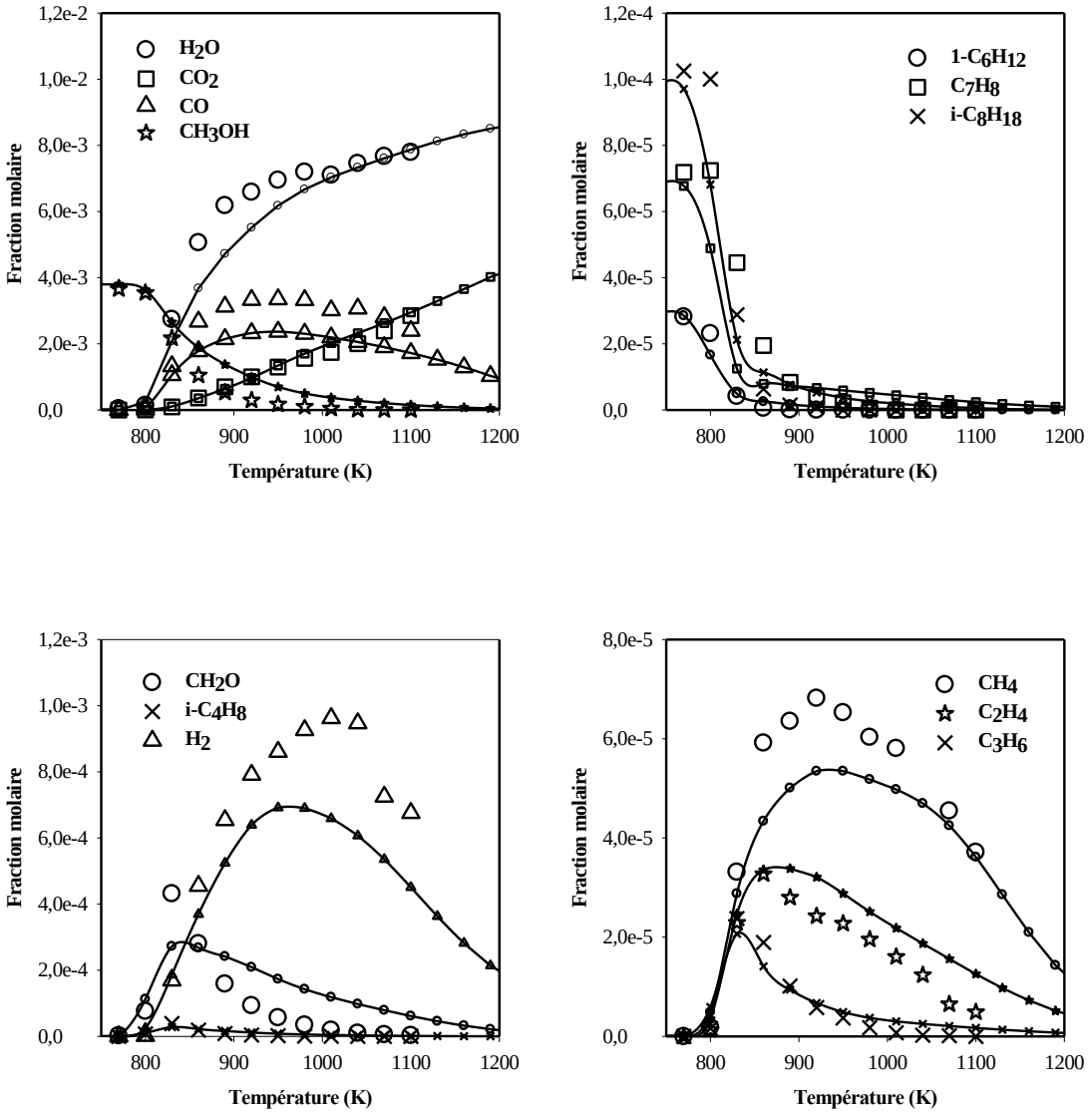


Figure VI-42 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange M85 en réacteur auto-agité à 10 atm : 4000 ppm de M85, φ=1 et τ=0,7 s

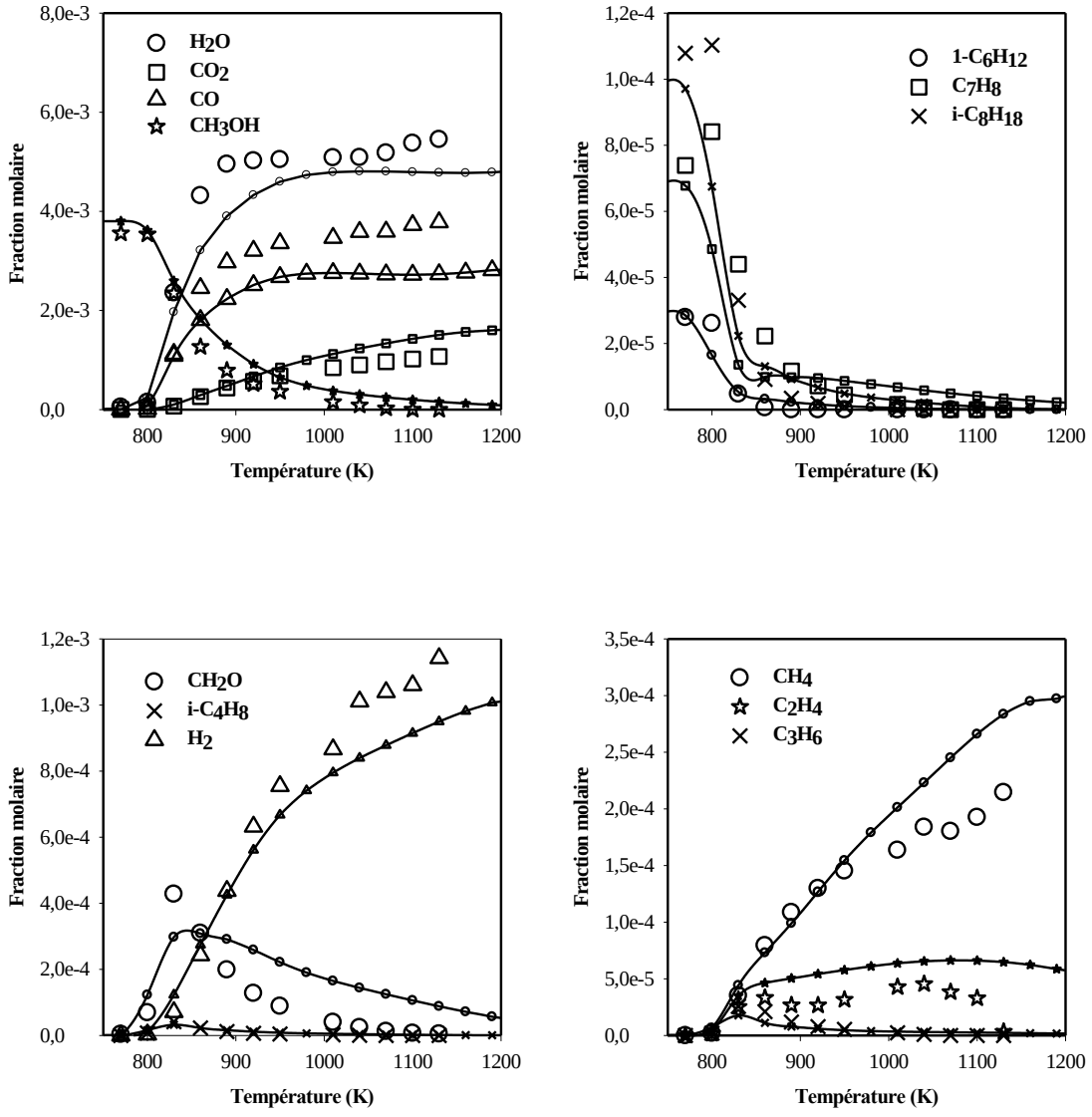


Figure VI-43 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange M85 en réacteur auto-agité à 10 atm : 4000 ppm de M85, φ=2 et τ=0,7 s

c) Comparaison de l'oxydation du méthanol pur et du mélange méthanol/surrogate d'essence (M85)

Sur la figure VI-44, sont présentées les vitesses de consommation du méthanol lorsqu'il est étudié seul et dans le mélange méthanol/essence (M85). L'oxydation du méthanol n'a été étudiée qu'à une seule richesse de 1. La comparaison des vitesses d'oxydation ne peut donc être faite que dans ces conditions, et on s'aperçoit que la vitesse de consommation du méthanol dans le mélange M85 est très proche de celle déterminée lorsque le méthanol est seul. La substitution d'une partie du méthanol par l'essence (hex-1-ène, toluène et isooctane) n'a visiblement pas d'effet sur la réactivité du méthanol.

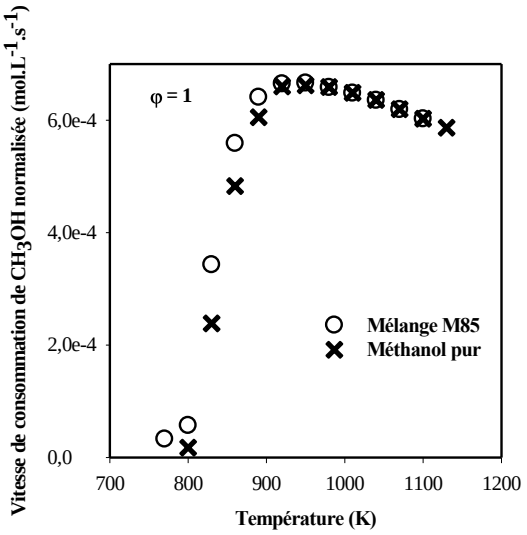


Figure VI-44 : Evolution en fonction de la température des vitesses de consommation normalisée du méthanol lors de l'oxydation du méthanol pur et du mélange M85 en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7 s)

La figure VI-45 présente une comparaison des résultats expérimentaux d'espèces intermédiaires (H_2O, CO, CO_2, CH_2O et H_2) formées en réacteur auto-agité lors de l'oxydation du méthanol pur et du mélange M85. Sur cette figure, on peut observer que les quantités de ces espèces sont très proches. Les espèces intermédiaires majoritaires (CO_2, CO, H_2, CH_2O) sont les mêmes que celles mesurées pour le méthanol étudié seul.

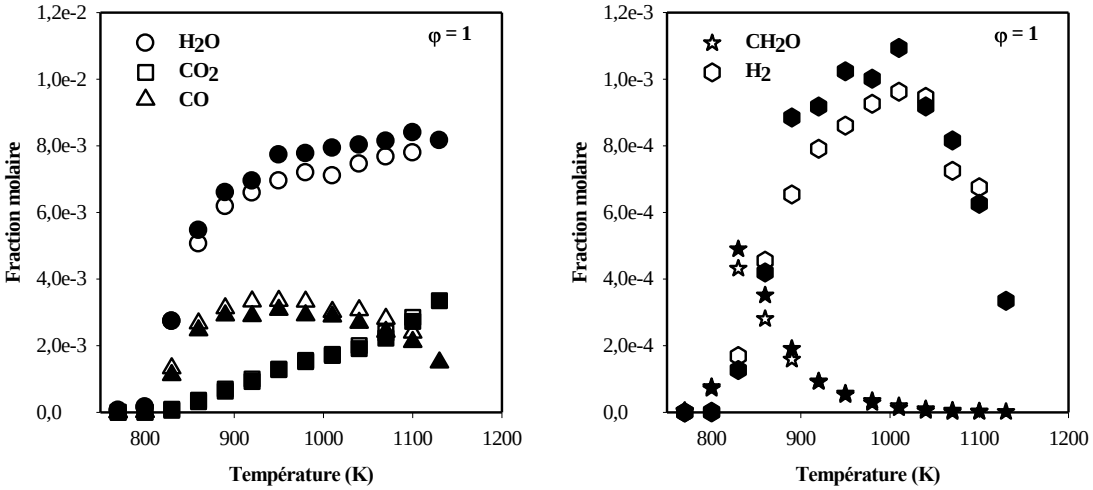


Figure VI-45 : Comparaison des fractions molaires d'espèces communes à l'oxydation de 4000 ppm du mélange M85 (symboles pleins) et de 4000 ppm de méthanol (symboles creux) pour φ=1

2.2. Oxydation des mélanges éthanol/surrogate d'essence (E85)

a) conditions expérimentales

Le mélange étudié (E85) est un mélange volumique composé de 85 % d'éthanol et 15 % d'essence. Le tableau VI-9 présente les conditions dans lesquelles l'oxydation de l'E85 a été étudiée en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{E85} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$23{,}560.10^{-3}$	$9{,}7444.10^{-1}$	0,3	770-1220
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$11{,}780.10^{-3}$	$9{,}8622.10^{-1}$	0,6	770-1220
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$7{,}070.10^{-3}$	$9{,}9093.10^{-1}$	1	770-1220
10	0,7	$2{,}0.10^{-3}$	$3{,}534.10^{-3}$	$9{,}9446.10^{-1}$	2	770-1220

Tableau VI-9 : Oxydation du mélange E85 en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-46 à VI-49 présentent une comparaison entre les résultats expérimentaux et simulés.

Globalement, le modèle représente convenablement les résultats expérimentaux. Cependant, le modèle sous-estime les quantités de CO, CH_4 et C_2H_4 formées. La consommation des différents réactifs hydrocarbonés (éthanol, isooctane, toluène et hex-1-ène) sont correctement reproduite par le modèle.

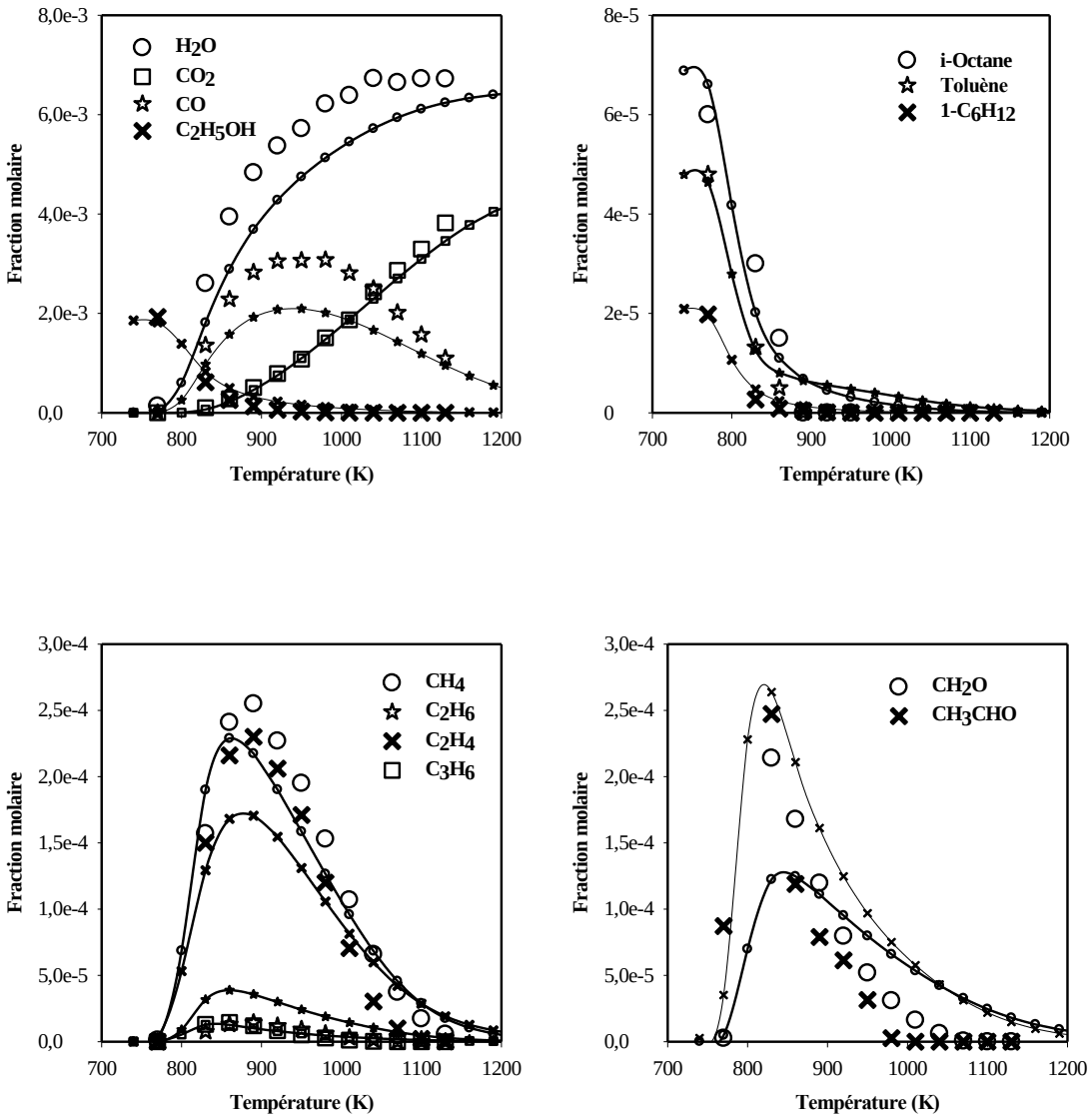


Figure VI- 46: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/essence (E85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm du mélange, φ=0,3 et τ=0,7 s

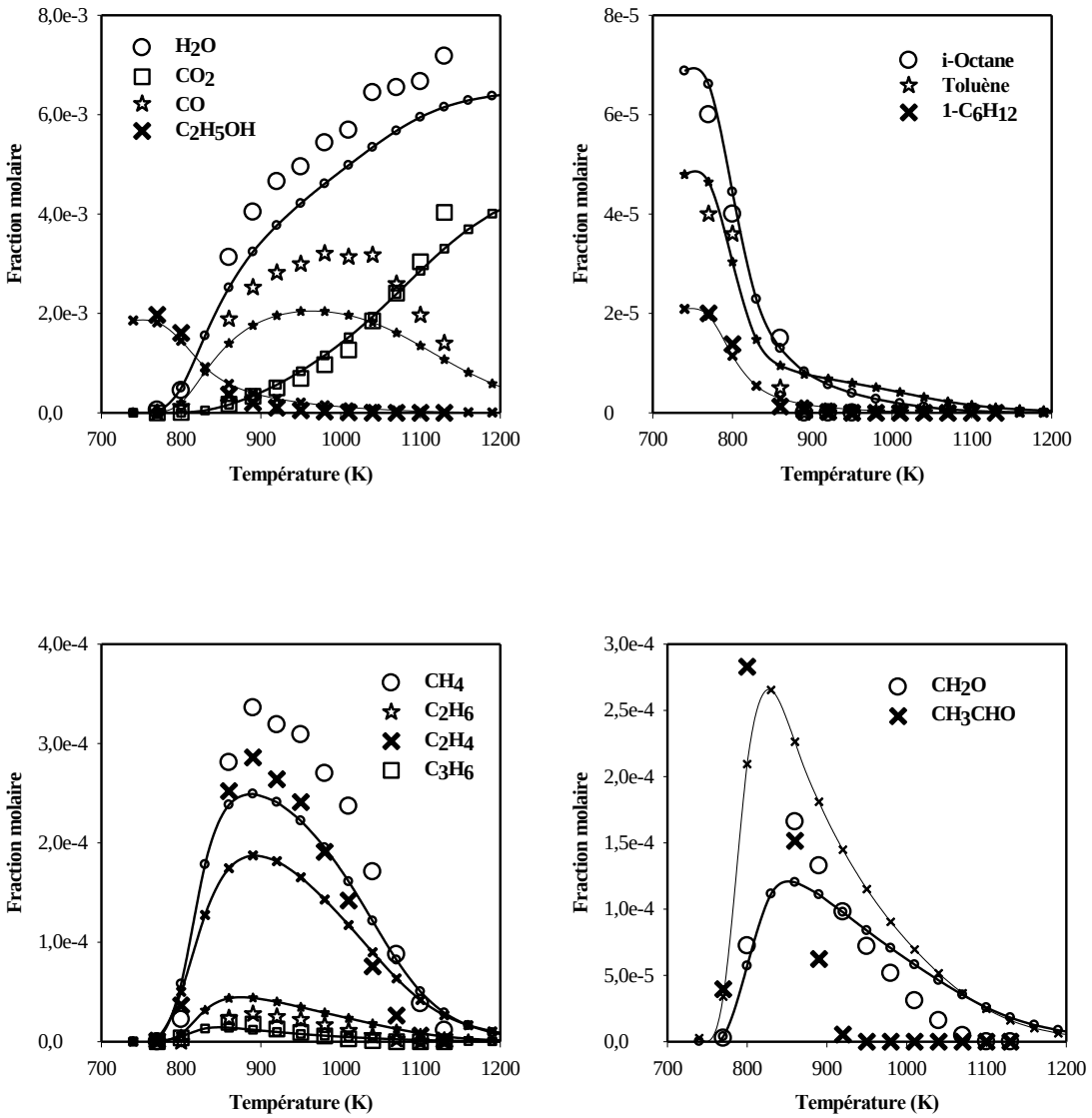


Figure VI- 47: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/essence (E85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm du mélange, φ=0,6 et τ=0,7 s

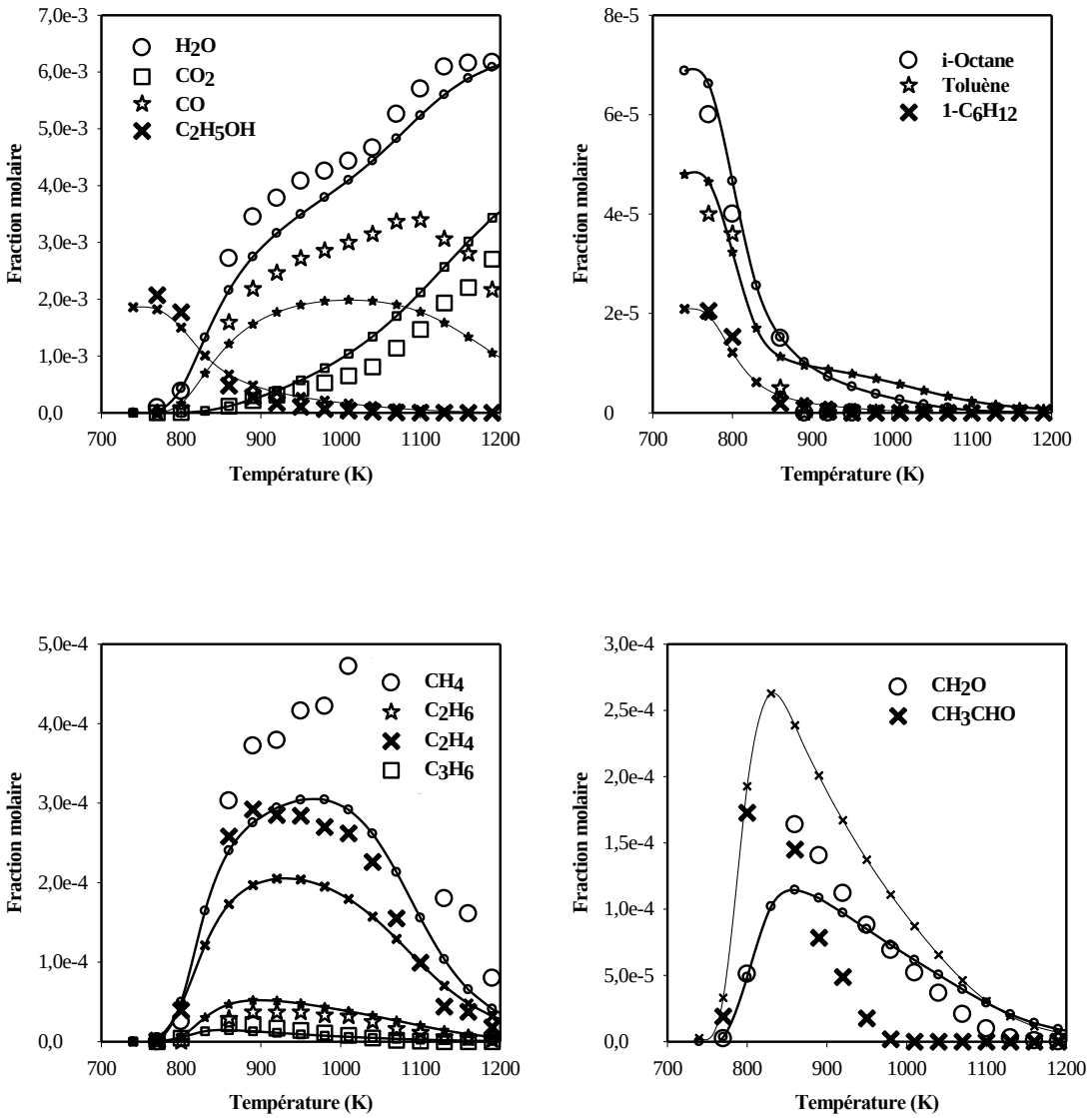


Figure VI- 48: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/essence (E85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

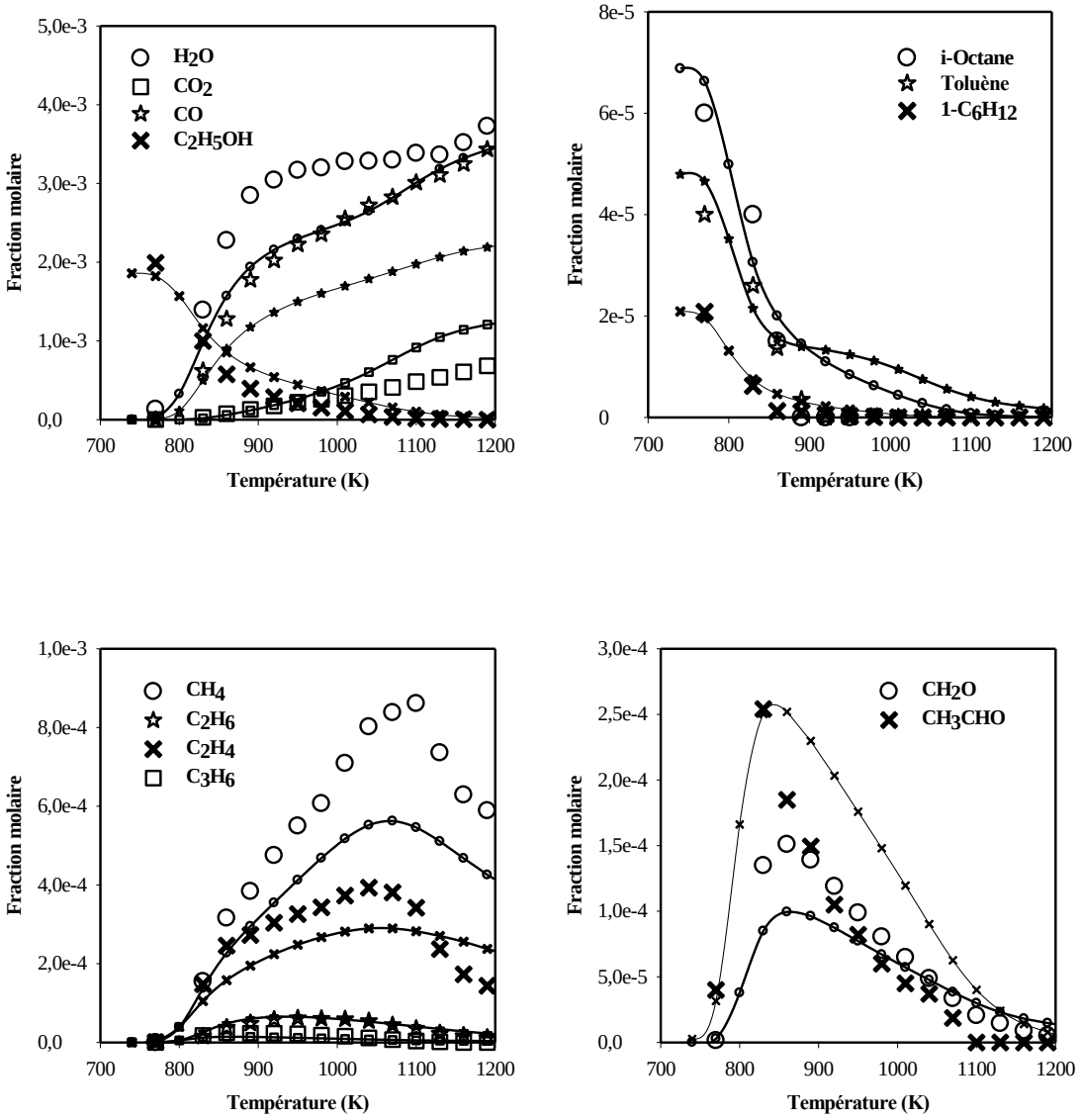


Figure VI- 49: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/essence (E85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 2000 ppm du mélange, φ=2 et τ=0,7 s

c) Comparaison de l'oxydation de l'éthanol pur et du mélange éthanol/ surrogate d'essence (E85)

La figure VI-50 présente une comparaison des vitesses de consommation normalisées de l'éthanol lorsqu'il est oxydé seul ou en mélange (E85) en fonction de la température. On note que la vitesse de consommation de l'éthanol lorsqu'il est étudié seul est sensiblement identique à celle déterminée dans le mélange E85. Néanmoins, l'éthanol dans le mélange E85 est légèrement plus réactif que l'éthanol pur entre 900 et 1000 K. Cette différence peut-être due à la formation supplémentaire d'un "pool" de petits radicaux (OH, HO_2) issus de l'oxydation de l'isooctane, du toluène et du hex-1-ène pris comme modèles d'hydrocarbures représentant l'essence.

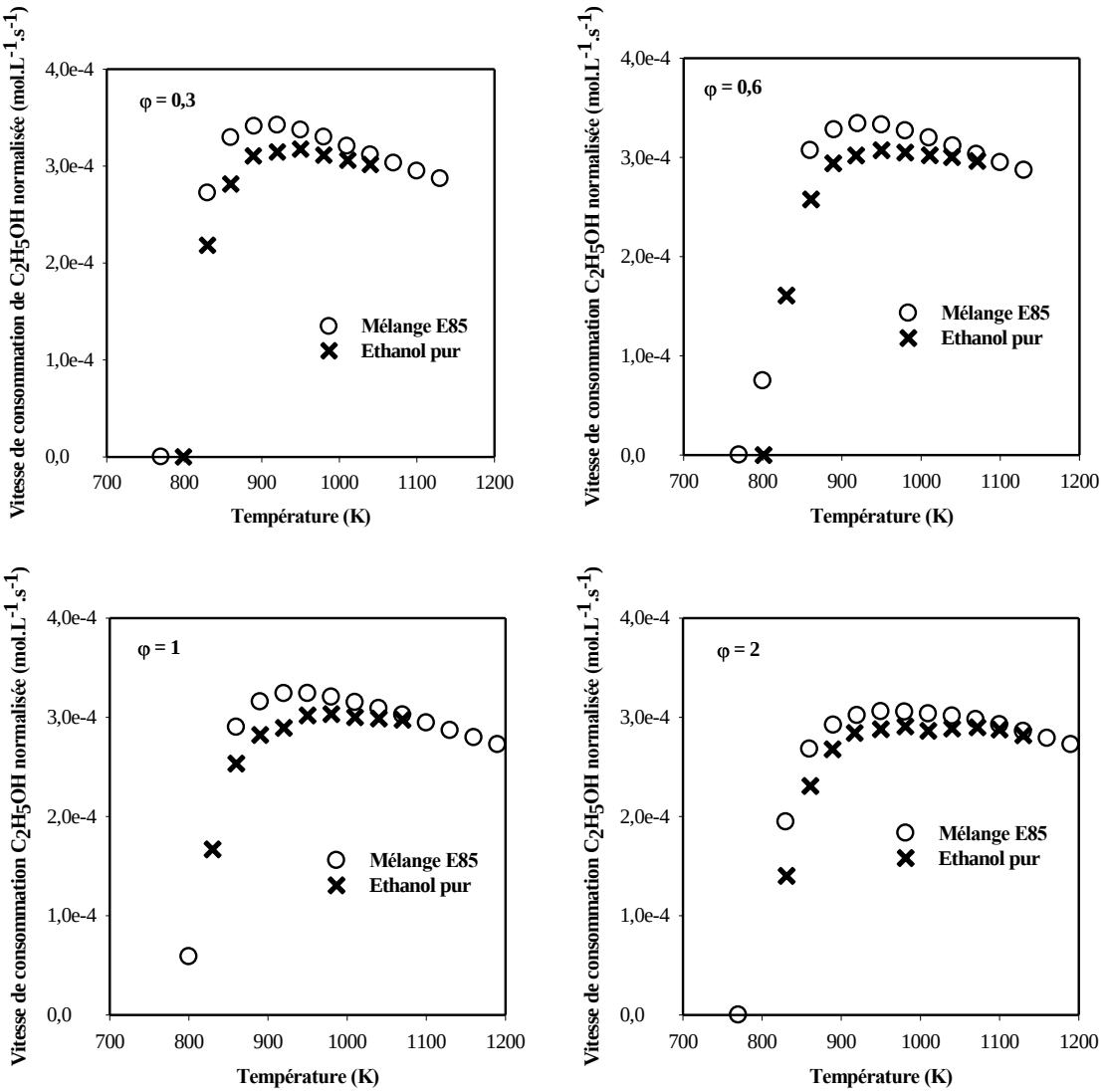


Figure VI-50 : Evolution en fonction de la température de la vitesse de consommation normalisée de l'éthanol utilisé pur et dans le mélange E85 en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7 s)

Sur la figure VI-51, sont comparées les quantités en fonction de la température des espèces quantifiées à la fois lors de l'oxydation de l'éthanol pur et du mélange E85 pour les 4 richesses étudiées : 0,3 ; 0,6 ; 1,0 et 2,0. On peut constater que les fractions molaires des espèces issues de

l'oxydation du mélange E85 sont légèrement plus élevées que celles mesurées lors de l'oxydation de l'éthanol pur. La substitution d'une partie de l'éthanol par de l'essence pourrait expliquer cette augmentation.

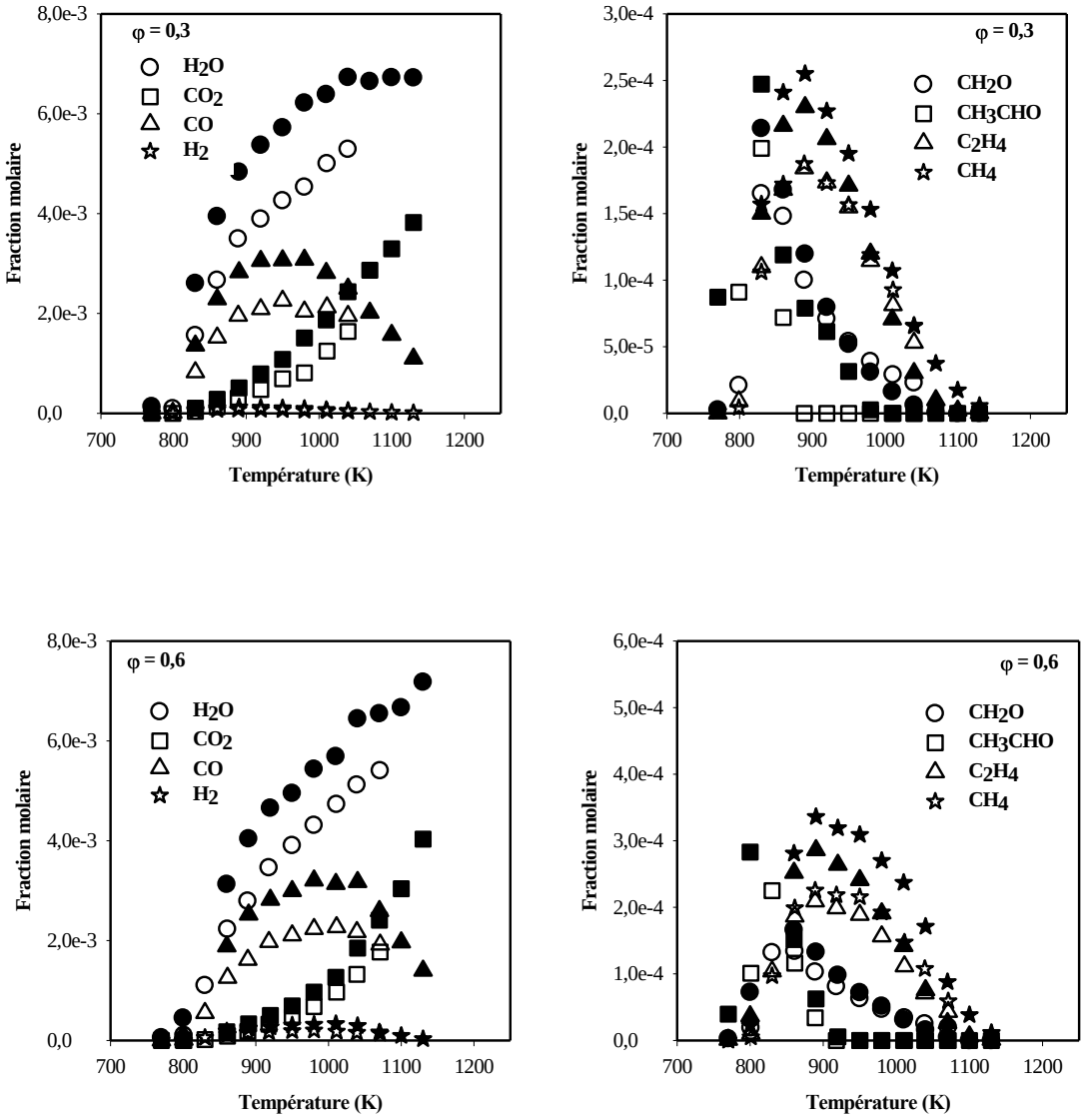


Figure VI-51 : Comparaison des principales espèces communes identifiées lors de l'oxydation de l'éthanol pur (symbole creux) et du mélange E85 (symboles pleins)

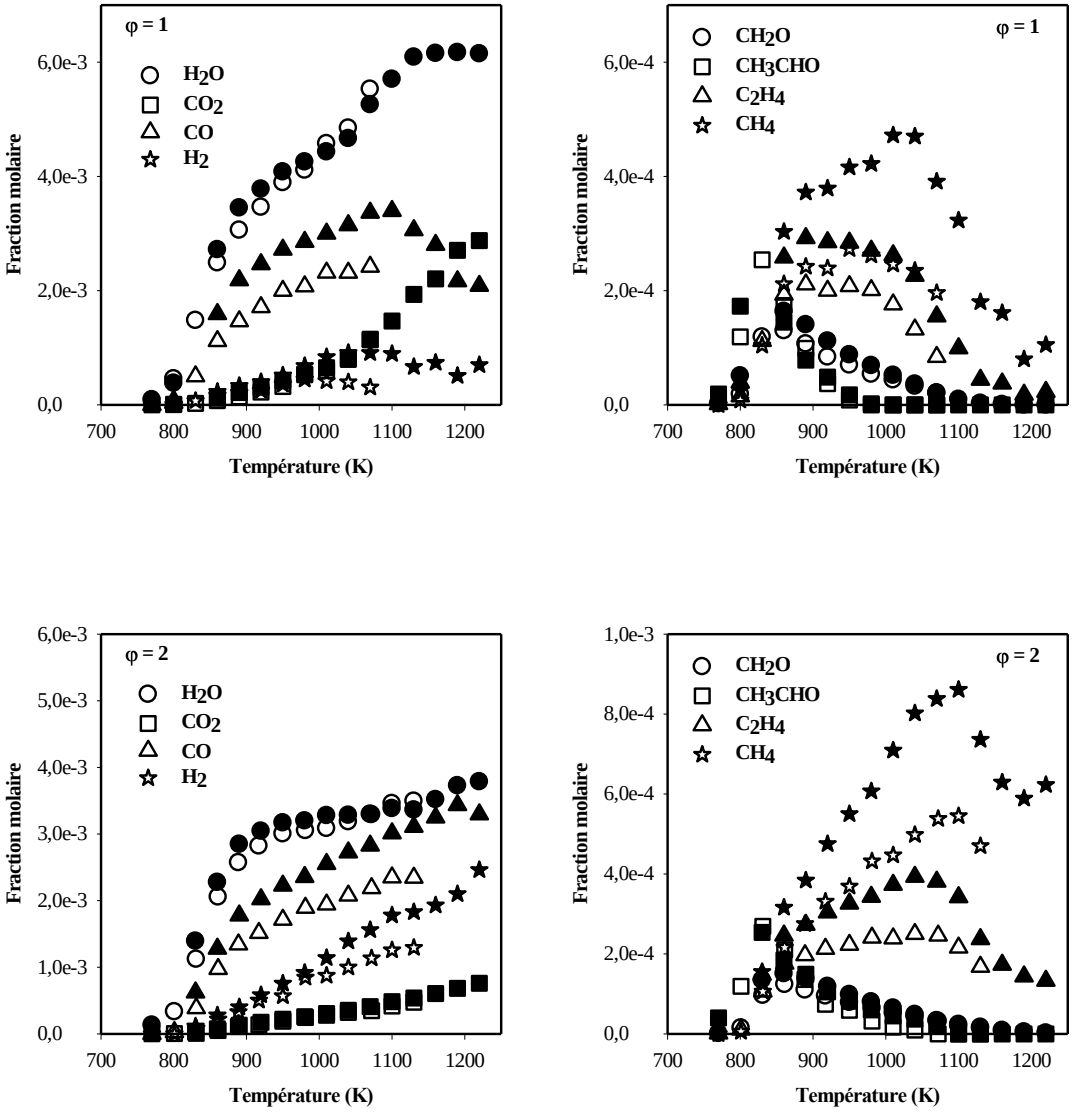


Figure VI-51 : Comparaison des principales espèces communes identifiées lors de l'oxydation de l'éthanol pur (symbole creux) et du mélange E85 (symboles pleins)

2.3. Oxydation des mélanges éthanol/n-heptane

a) Conditions expérimentales

Concernant les mélanges éthanol/n-heptane, nous avons étudié deux mélanges d'éthanol/n-heptane dans les proportions 20/80 (mole/mole) et 50/50 (mole/mole). Dans le tableau VI-10, sont résumées les conditions expérimentales d'étude pour ces deux mélanges.

Ethanol/n-Heptane (%mole)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$10{,}50.10^{-3}$	$9{,}8875.10^{-1}$	0,5	530-1100
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$5{,}25.10^{-3}$	$9{,}9400.10^{-1}$	1,0	530-1100
20/80	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$14{,}10.10^{-3}$	$9{,}8515.10^{-1}$	0,5	530-1100
20/80	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$7{,}05.10^{-3}$	$9{,}9220.10^{-1}$	1	530-1100

Tableau VI-10 : Oxydation du mélange éthanol/n-heptane en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-52 à VI-55 présentent une comparaison entre les résultats expérimentaux et simulés. D'une manière générale, le modèle prédit correctement la consommation de l'éthanol et du n-heptane. On observe une consommation à basse température de l'éthanol entre 530 et 770 K, ce que prévoit également le modèle. Les profils des espèces détectées (CO, CO_2, CH_2O, CH_3CHO, CH_4, C_2H_4, C_3H_6 et H_2) sont bien reproduits. Cependant, des désaccords existent, en particulier sur le profil de l'acétaldéhyde où le modèle surestime sa quantité au-delà de 800 K.

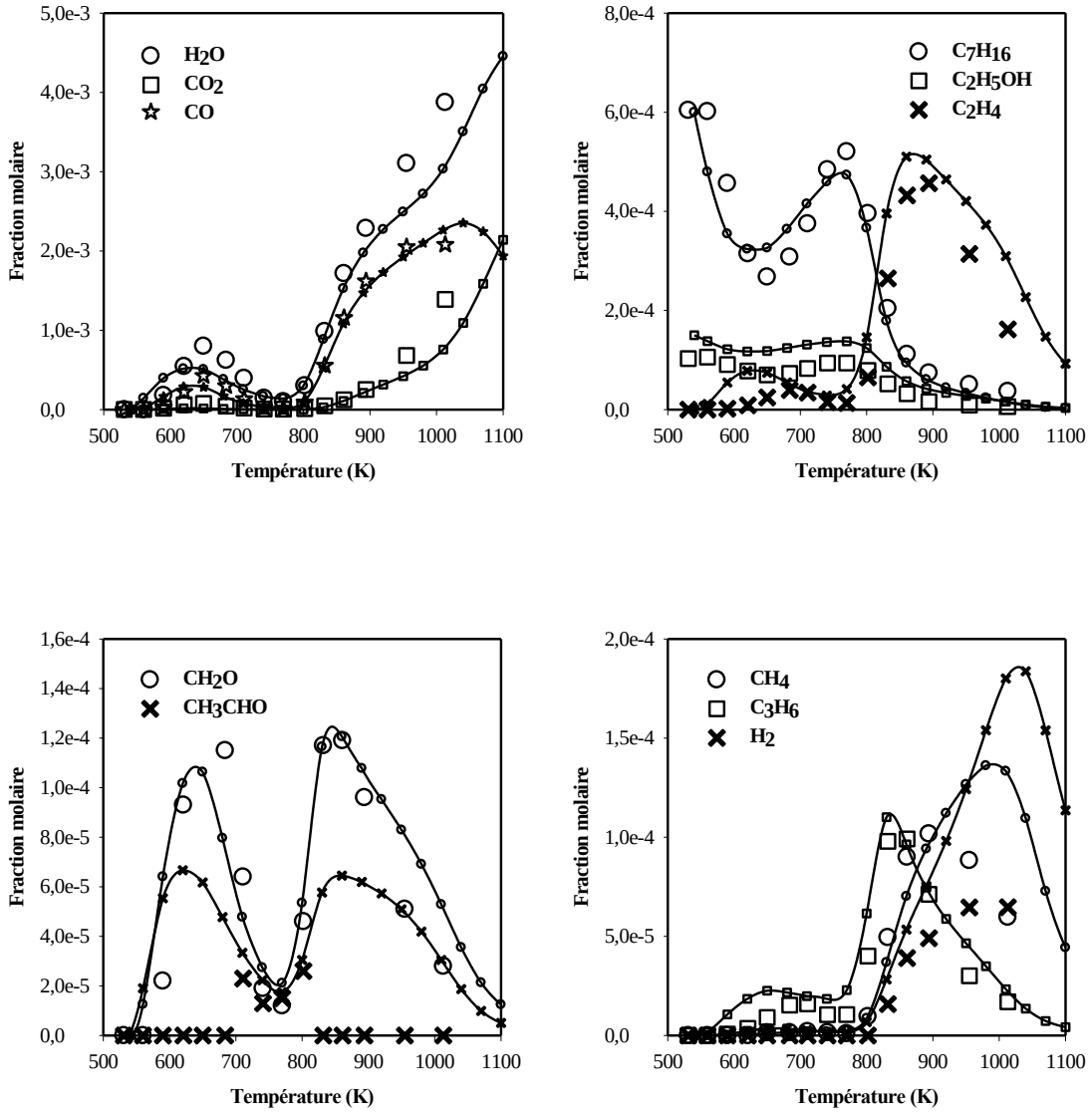


Figure VI-52 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/n-heptane 20-80 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5 et τ=0,7 s

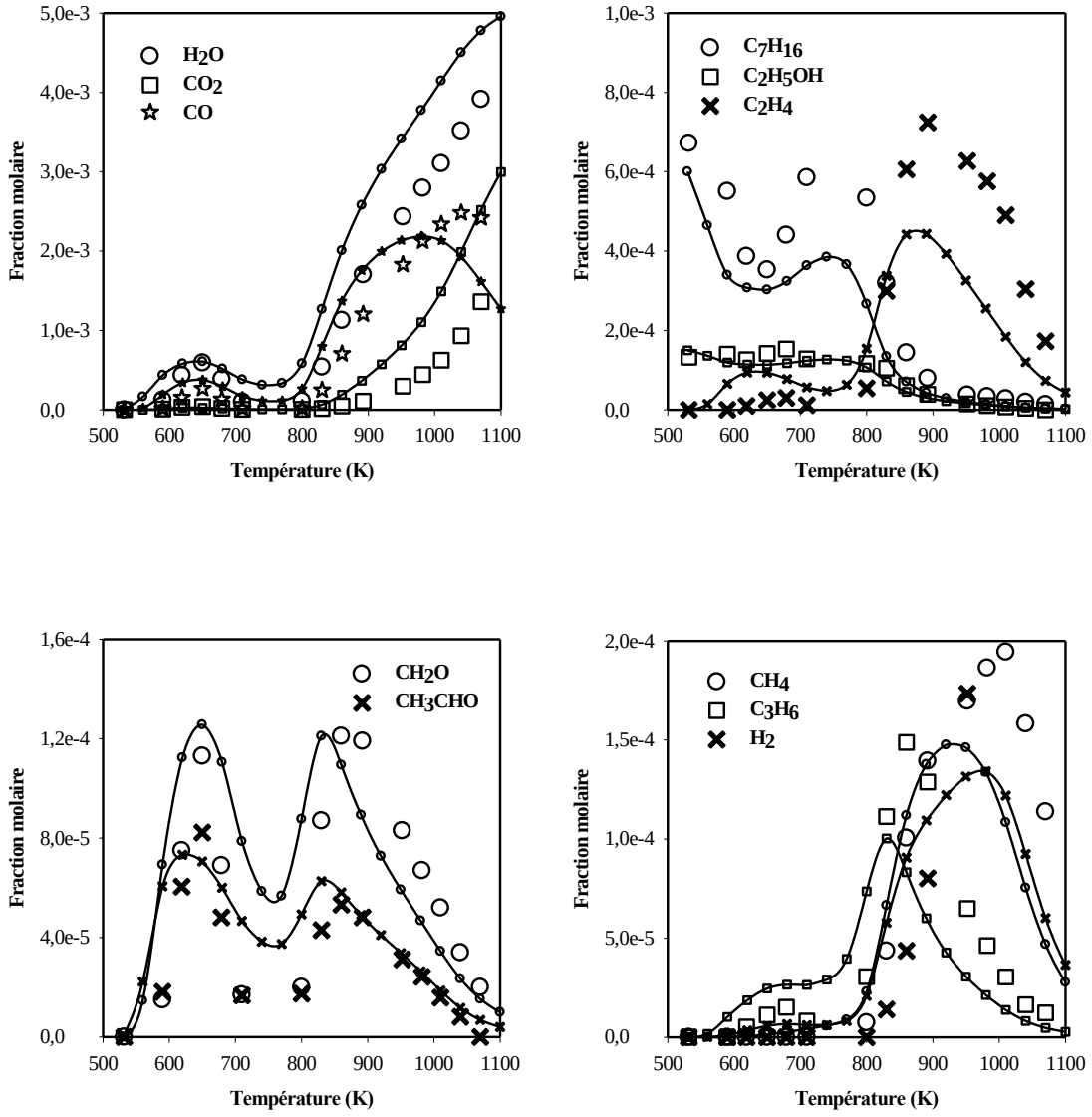


Figure VI-53 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/n-heptane 20-80 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

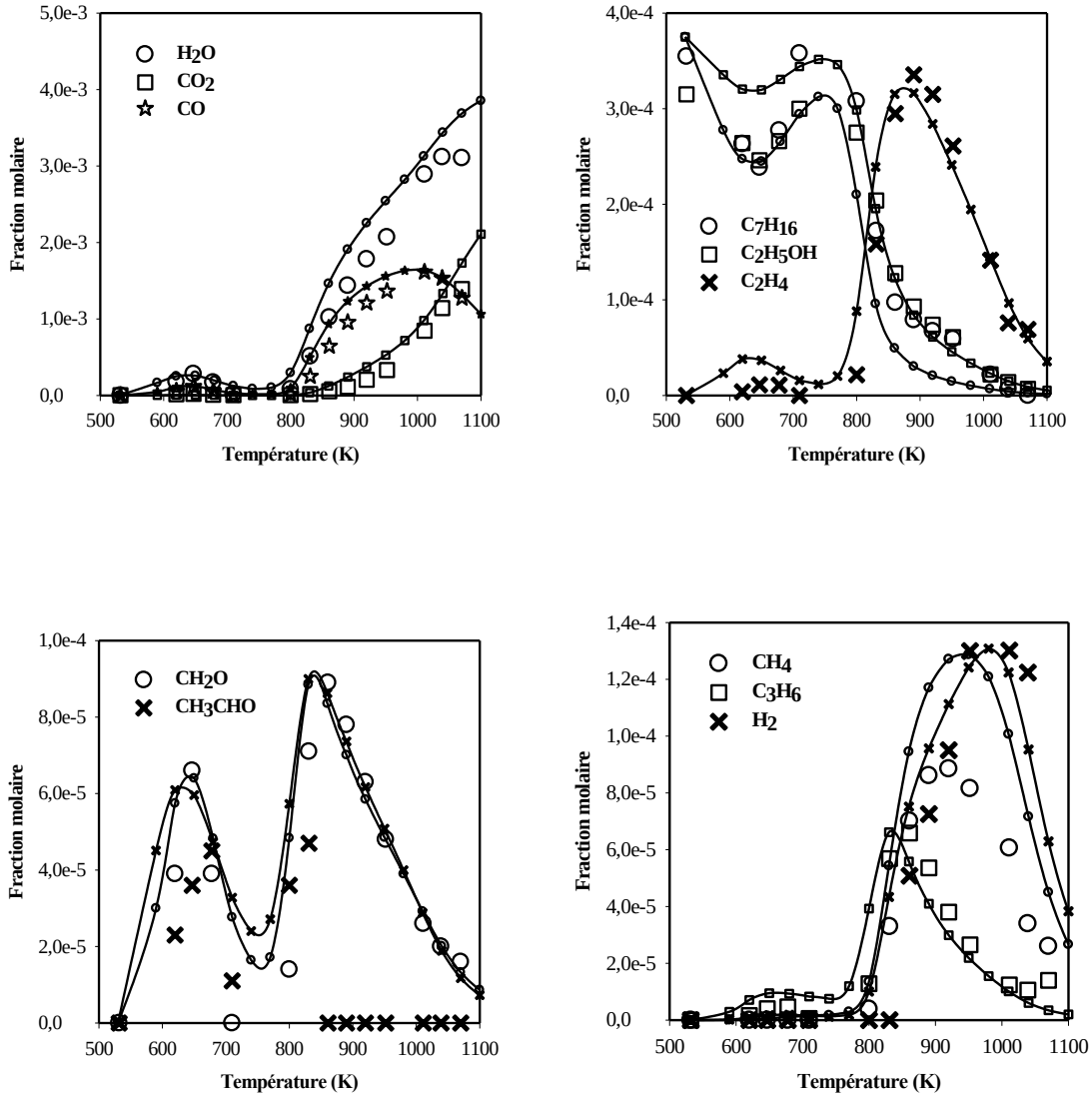


Figure VI-54 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange éthanol/n-heptane 50-50 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5 et τ=0,7 s

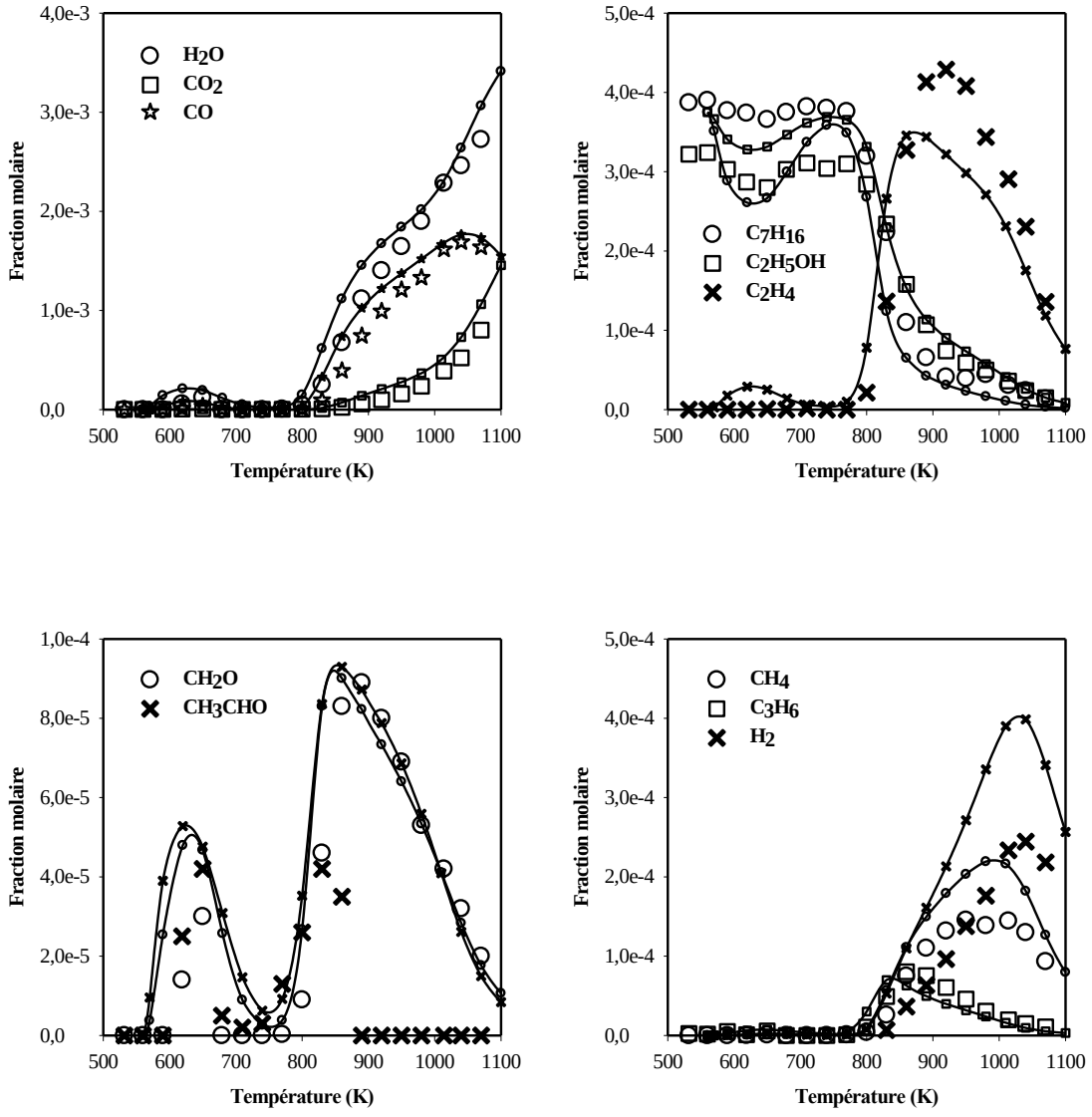


Figure VI-55 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange Ethanol/n-heptane 50-50 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

c) Comparaison de la vitesse d'oxydation de l'éthanol et du n-heptane dans le mélange éthanol/n-heptane

Sur la figure VI-56, sont représentées les vitesses de consommation de l'éthanol et du n-heptane dans les deux mélanges étudiés. On peut observer que les deux vitesses de consommation des deux hydrocarbures sont très similaires dans le cas du mélange équimolaire. Concernant le mélange éthanol/n-heptane 20/80 (mole/mole), la vitesse de consommation du n-heptane est largement supérieure à celle de l'éthanol. Pour tous ces mélanges, le n-heptane a un effet promoteur sur l'oxydation de l'éthanol, notamment à basse température où l'éthanol, lorsqu'il est étudié seul, ne présentait aucune réactivité.

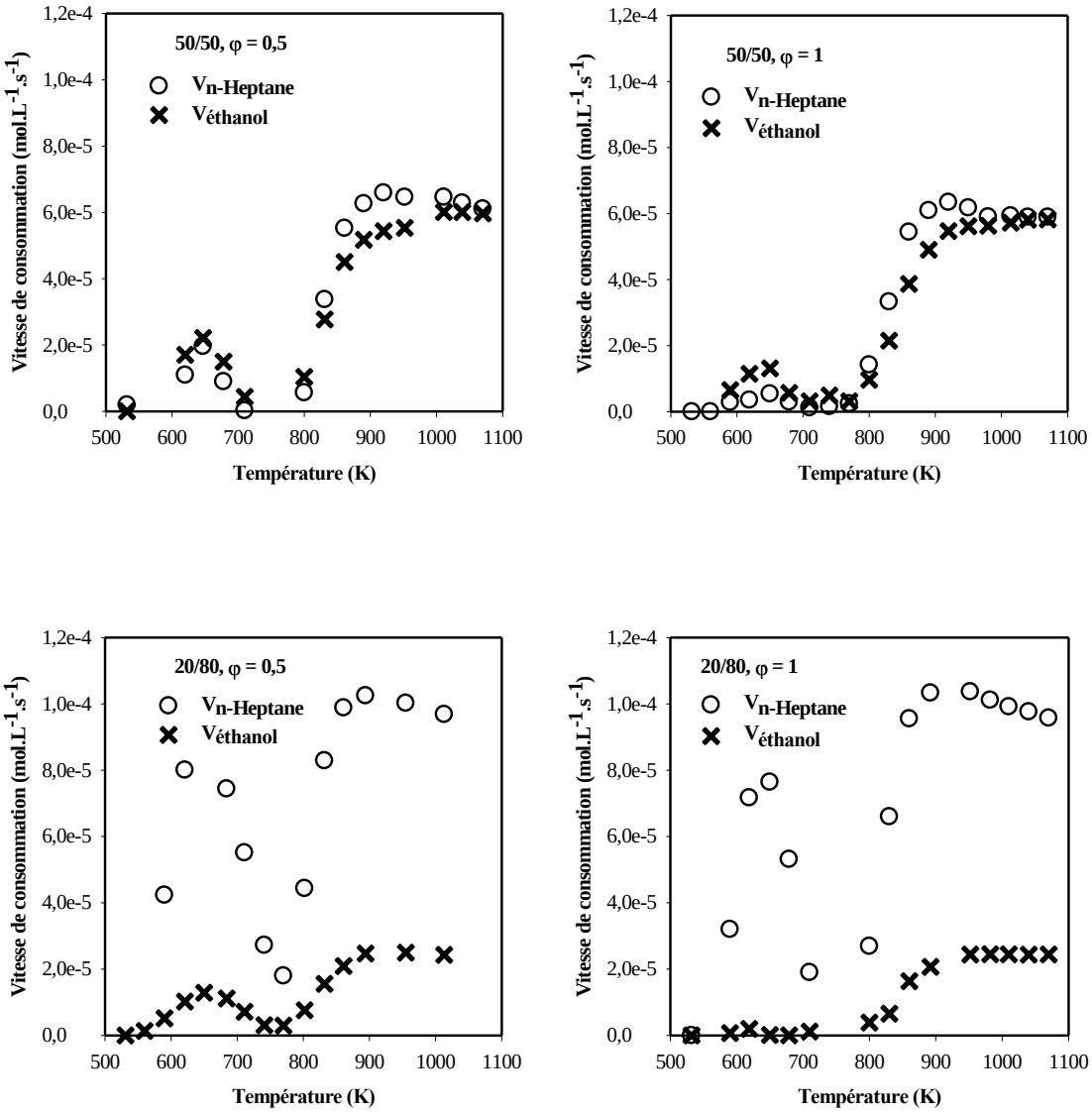


Figure VI-56 : Evolution en fonction de la température des vitesses de consommation de l'éthanol et du n-heptane dans les mélanges étudiés en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7s)

2.4. Oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85)

a) conditions expérimentales

Le carburant B85 est un mélange composé de 85 % de butan-1-ol et 15 % de surrogate d'essence en volume. Le tableau VI-11 présente les conditions d'étude de l'oxydation du mélange en réacteur auto-agité.

Pression (atm)	Temps de passage (s)	X_{B85} initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$21{,}648.10^{-3}$	$9{,}7735.10^{-1}$	0,3	770-1220
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$10{,}824.10^{-3}$	$9{,}8817.10^{-1}$	0,6	770-1220
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$6{,}494.10^{-3}$	$9{,}9251.10^{-1}$	1,0	770-1220
10	0,7	$1{,}0.10^{-3}$	$3{,}247.10^{-3}$	$9{,}9575.10_{-1}$	2,0	770-1220

Tableau VI-11 : Oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-57 à VI-60 montrent la confrontation entre les profils des fractions molaires expérimentaux et simulés des réactifs et produits issus de l'oxydation du mélange B85. Il apparaît que le modèle reproduit correctement les profils des réactifs (butan-1-ol, hex-1-ène, toluène et isooctane) ainsi que le maximum de formaldéhyde. Cependant, l'acétaldéhyde et le butanal sont eux sous-estimés. Le modèle reproduit également convenablement les quantités de méthane et d'éthylène.

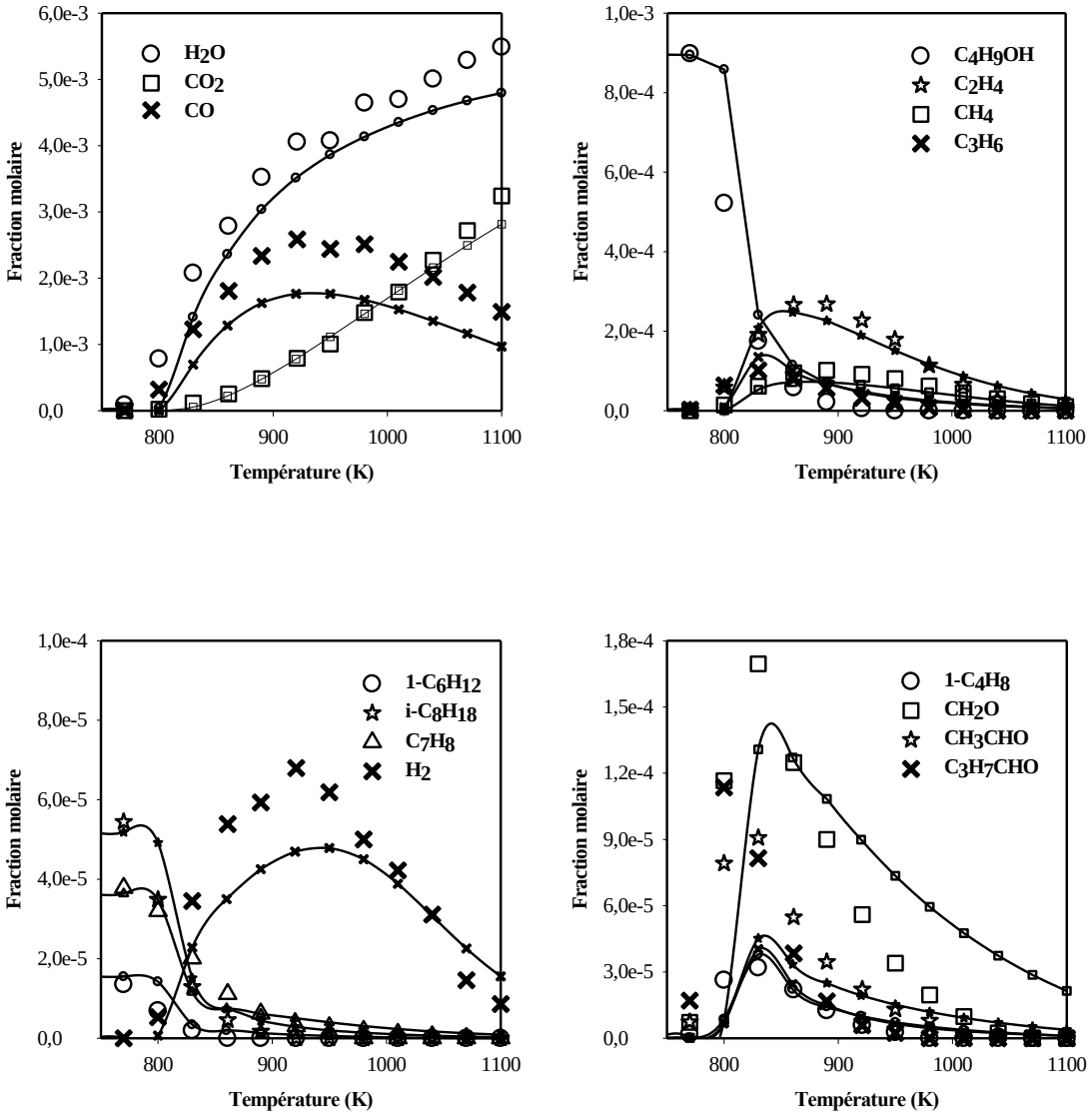


Figure VI-57: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm du mélange, φ=0,3 et τ=0,7 s

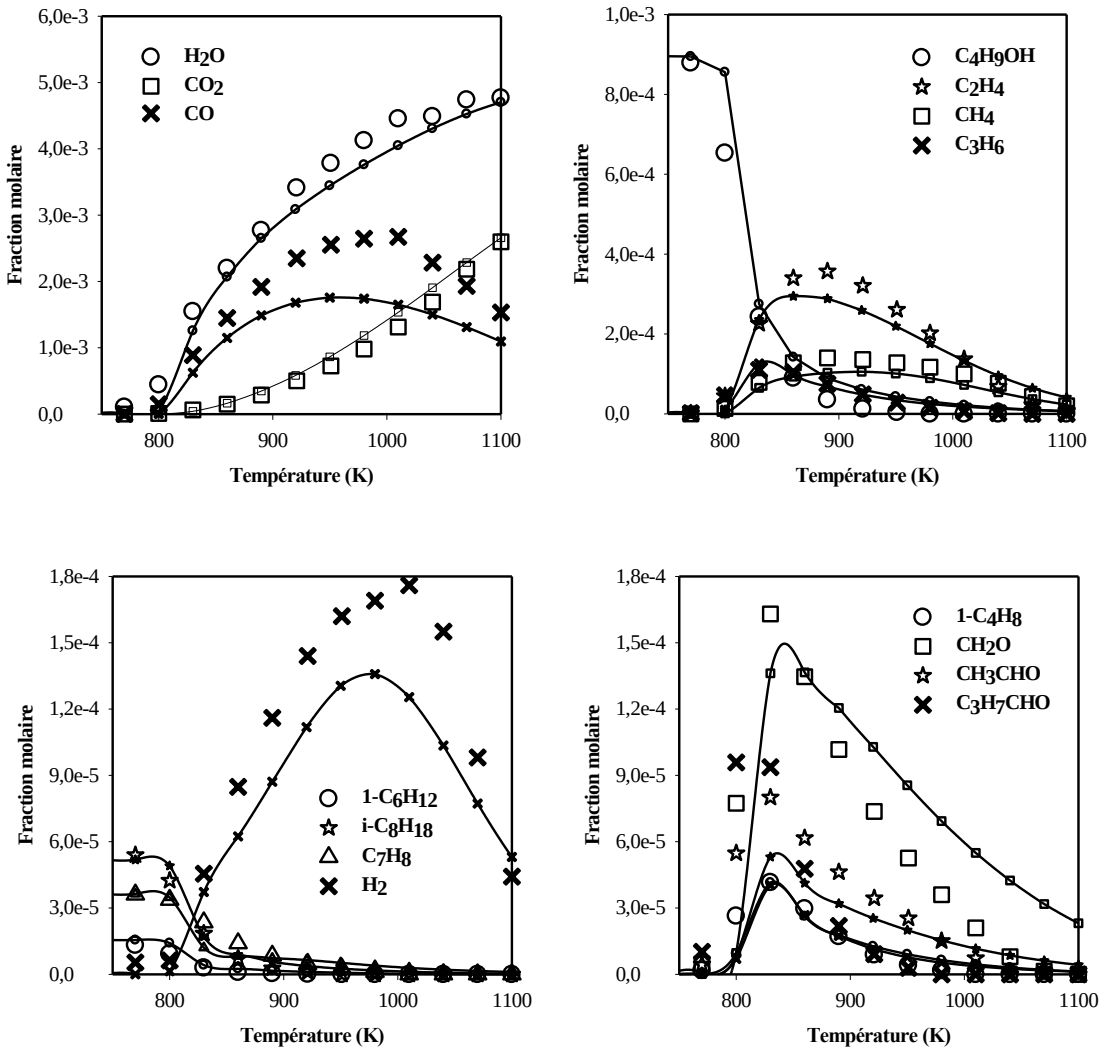


Figure VI-58: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm du mélange, φ=0,6 et τ=0,7 s

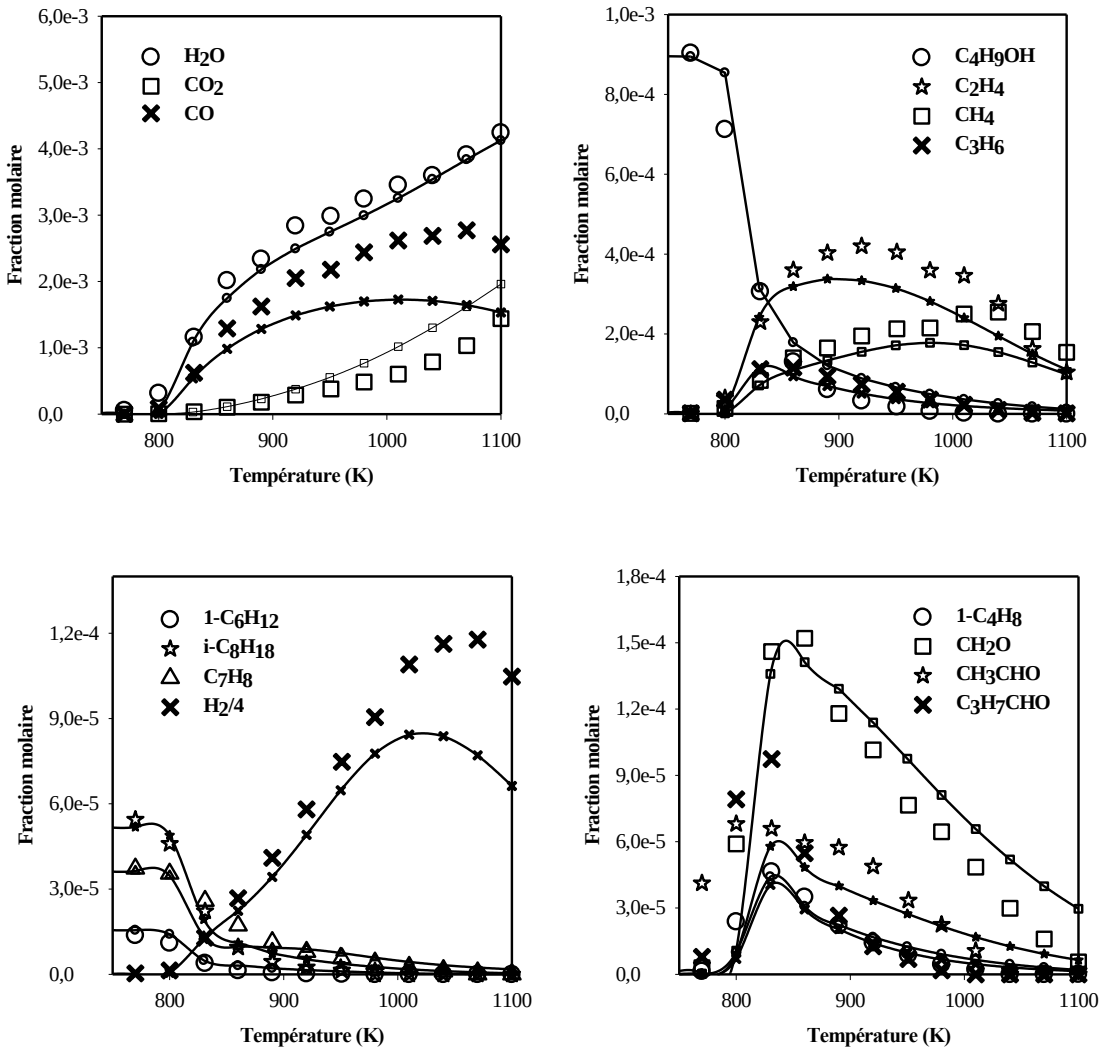


Figure VI-59: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

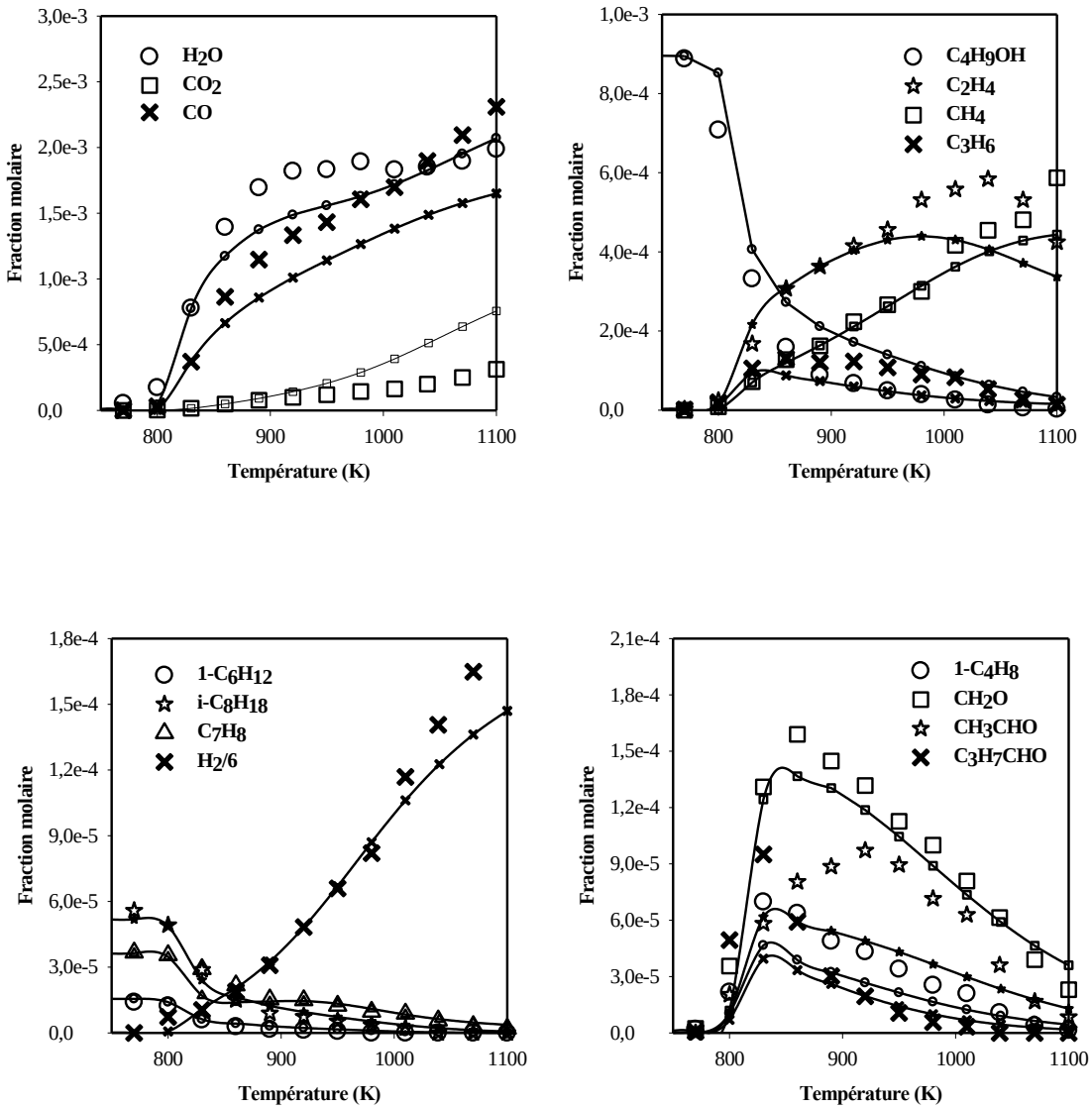


Figure VI-60: Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence (B85) molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 1000 ppm du mélange, φ=2 et τ=0,7 s

c) Comparaison de l'oxydation du butan-1-ol pur et du mélange butan-1-ol/essence (B85)

L'oxydation du butan-1-ol pur a été étudiée aux richesses de 0,5 ; 1 ; 2 et 4 et celle du mélange butan-1-ol/essence (B85) a été faite pour les richesses 0,3 ; 0,6 ; 1 et 2. Ainsi, une comparaison de la vitesse de consommation normalisée du butan-1-ol a pu être faite pour les richesses 1 et 2. La figure VI-61 présente ces comparaisons. Il apparaît que le butan-1-ol dans le mélange B85 est très légèrement plus réactif que le butan-1-ol sans additif. La substitution d'une partie du butan-1-ol par de l'essence favorise donc l'oxydation du butan-1-ol.

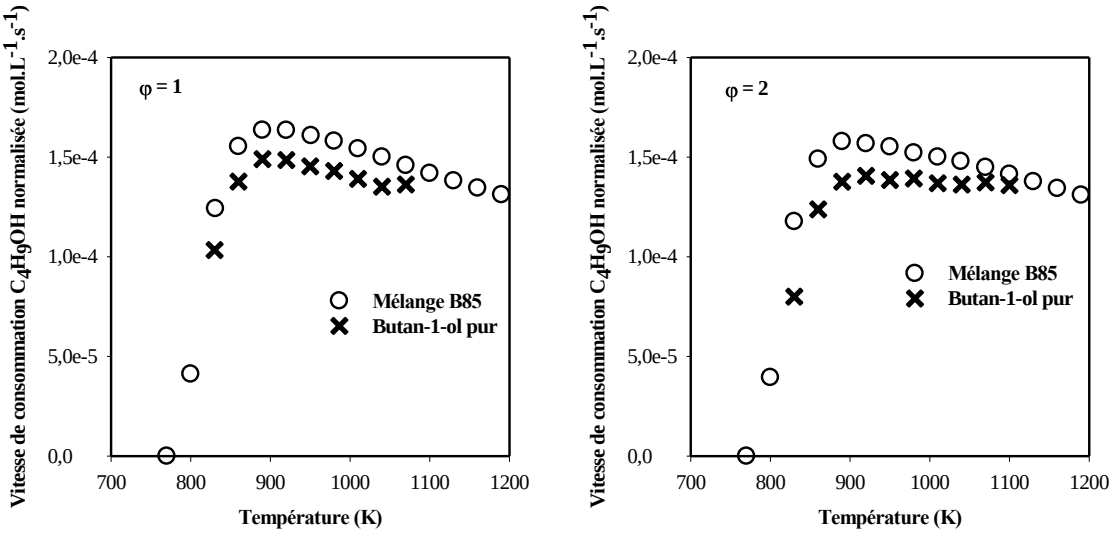


Figure VI-61 : Evolution en fonction de la température de la vitesse de consommation du 1-butanol lors de l'oxydation du butan-1-ol pur et du mélange butan-1-ol/surrogate d'essence en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7 s)

Sur la figure VI-62, sont comparées les fractions molaires des principales espèces communes à l'oxydation du butan-1-ol et du mélange B85 pour φ=1, les résultats étant les mêmes quelque soit la richesse. On peut constater que l'oxydation du butan-1-ol pur forme sensiblement les mêmes quantités d'espèces majoritaires que l'oxydation du mélange butan-1-ol/essence.

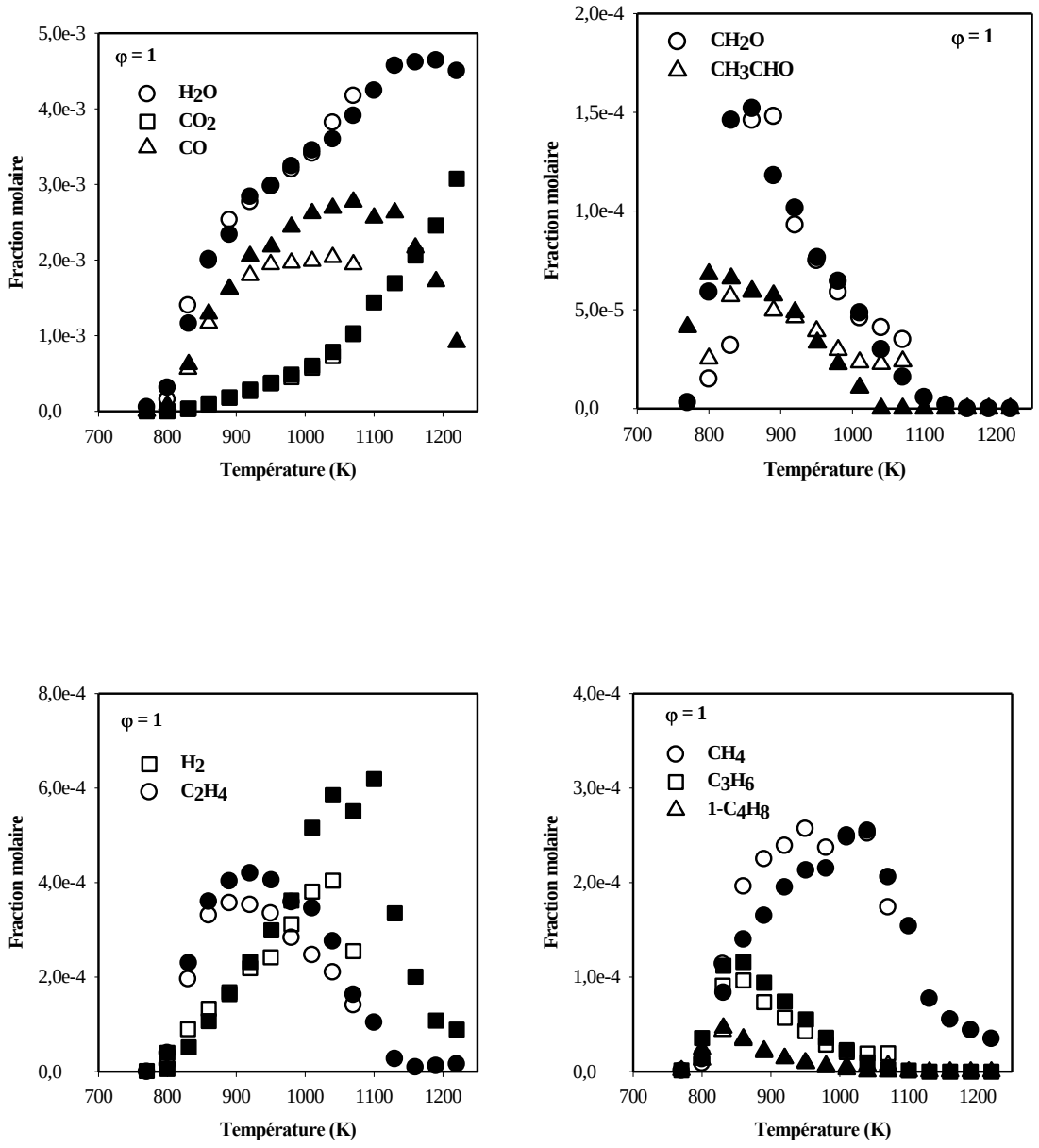


Figure VI-62 : Comparaison des principales espèces issues de l'oxydation du butan-1-ol pur (symboles vides) et du mélange butan-1-ol/essence (symboles pleins)

2.5. Oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane

a) conditions expérimentales

Nous avons étudié également l'oxydation de deux mélanges butan-1-ol/n-heptane. Le premier mélange est constitué, en fraction molaire, de 20% de butan-1-ol et de 80% de n-heptane. Le second est un mélange équimolaire butan-1-ol/n-heptane. Dans le tableau VI-12, sont résumées les conditions expérimentales d'étude pour ces deux mélanges.

1-butanol/n-Heptane (%mole)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$12{,}75.10^{-3}$	$9{,}865.10^{-1}$	0,5	530-1220
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$6{,}38.10^{-3}$	$9{,}928.10^{-1}$	1	530-1220
20/80	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$15{,}00.10^{-3}$	$9{,}843.10^{-1}$	0,5	530-1220
20/80	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$7{,}50.10^{-3}$	$9{,}918.10^{-1}$	1	530-1220

Tableau VI-12 : Oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

b) Confrontation modèle-expérience

Les figures VI-63 à VI-66 comparent les résultats des simulations et ceux obtenus expérimentalement.

Globalement, on peut constater que le modèle représente convenablement les résultats expérimentaux. Le modèle reproduit bien les profils des réactifs (butan-1-ol et n-heptane) et de la plupart des espèces détectées (H_2O, CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_4 et H_2). Les quantités de but-1-ène et de butanal sont sous-estimées par le modèle.

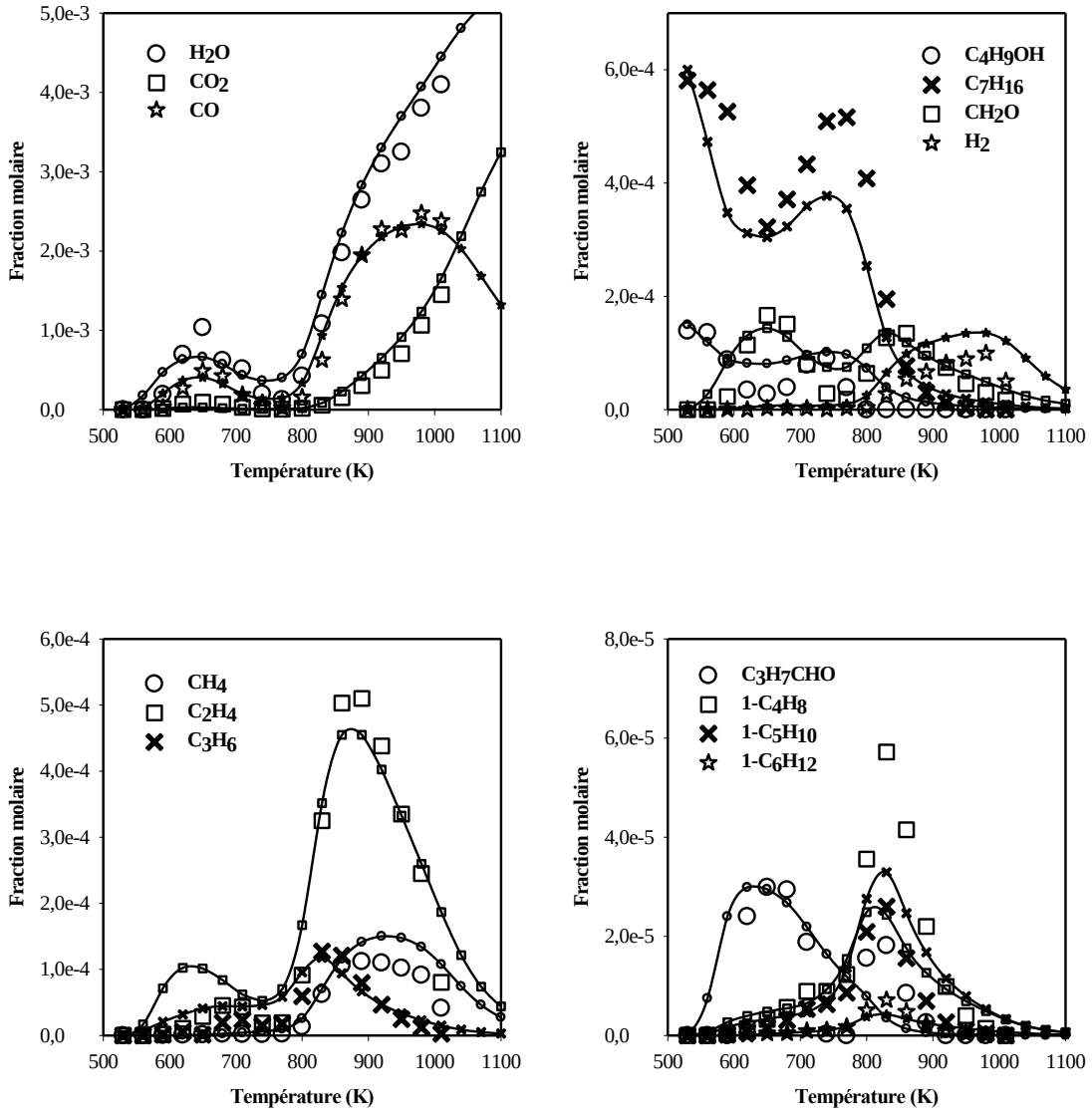


Figure VI-63 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 20-80 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5 et τ=0,7 s

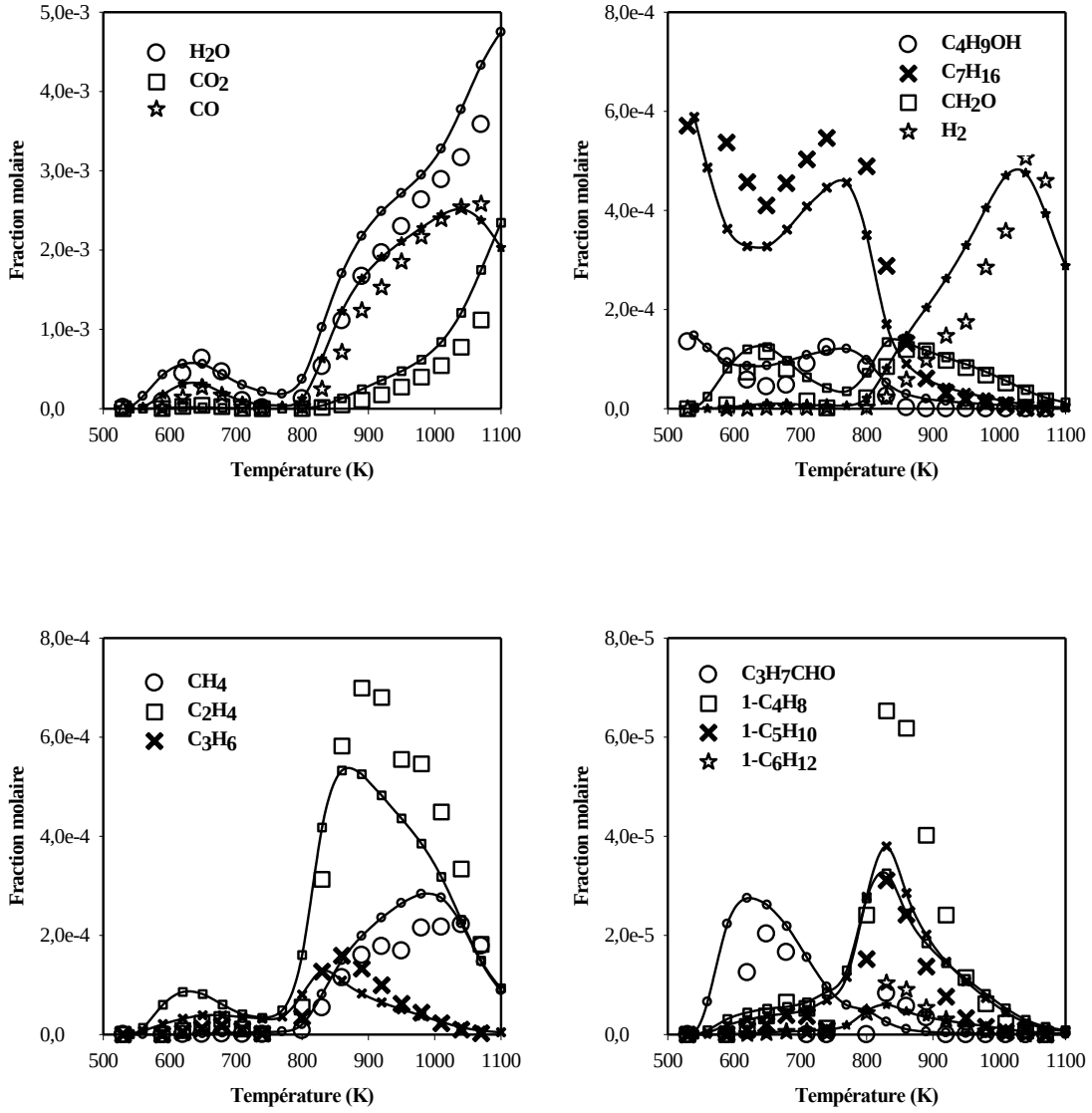


Figure VI-64 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 20-80 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

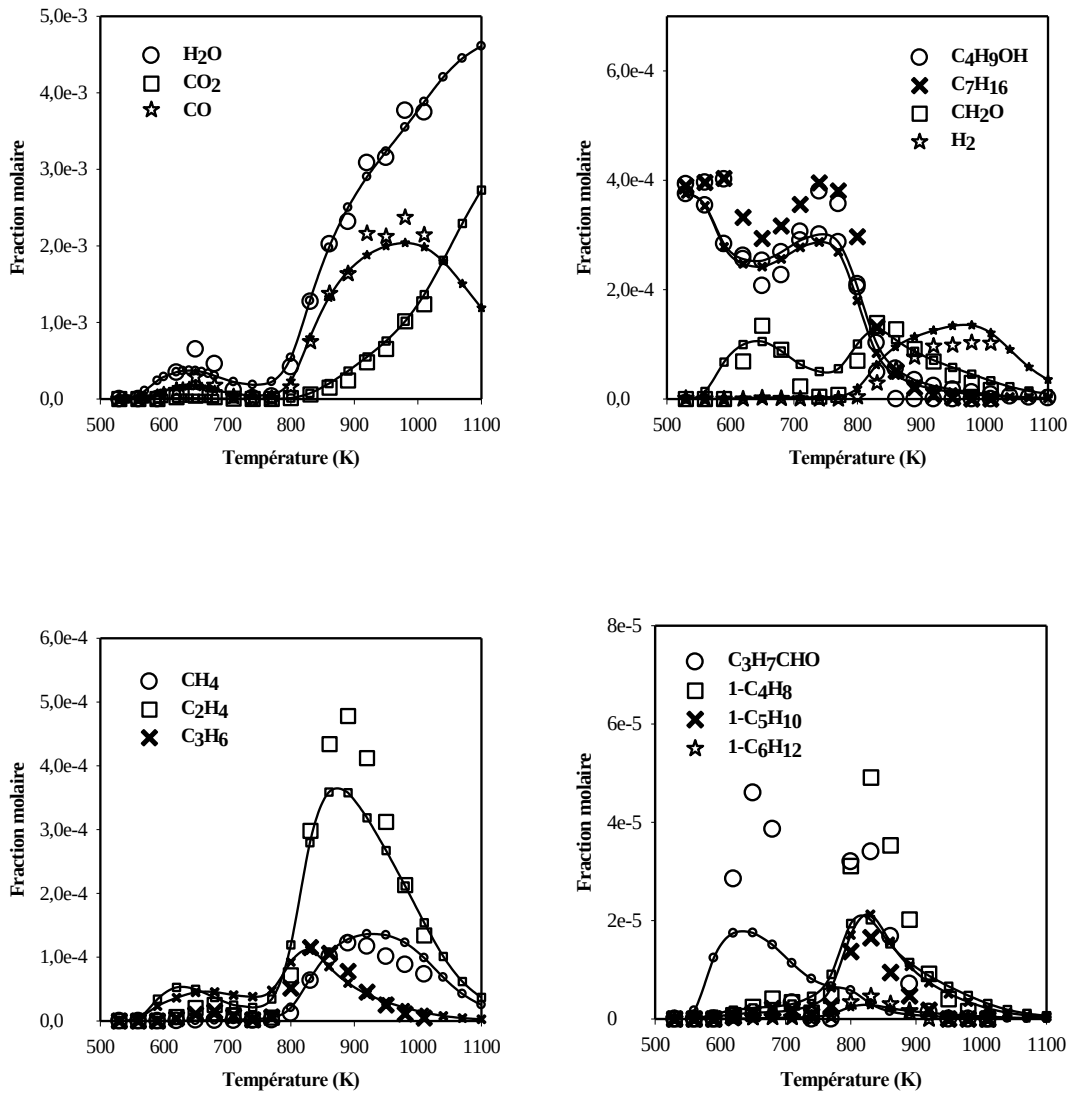


Figure VI-65 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 50-50 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5 et τ=0,7 s

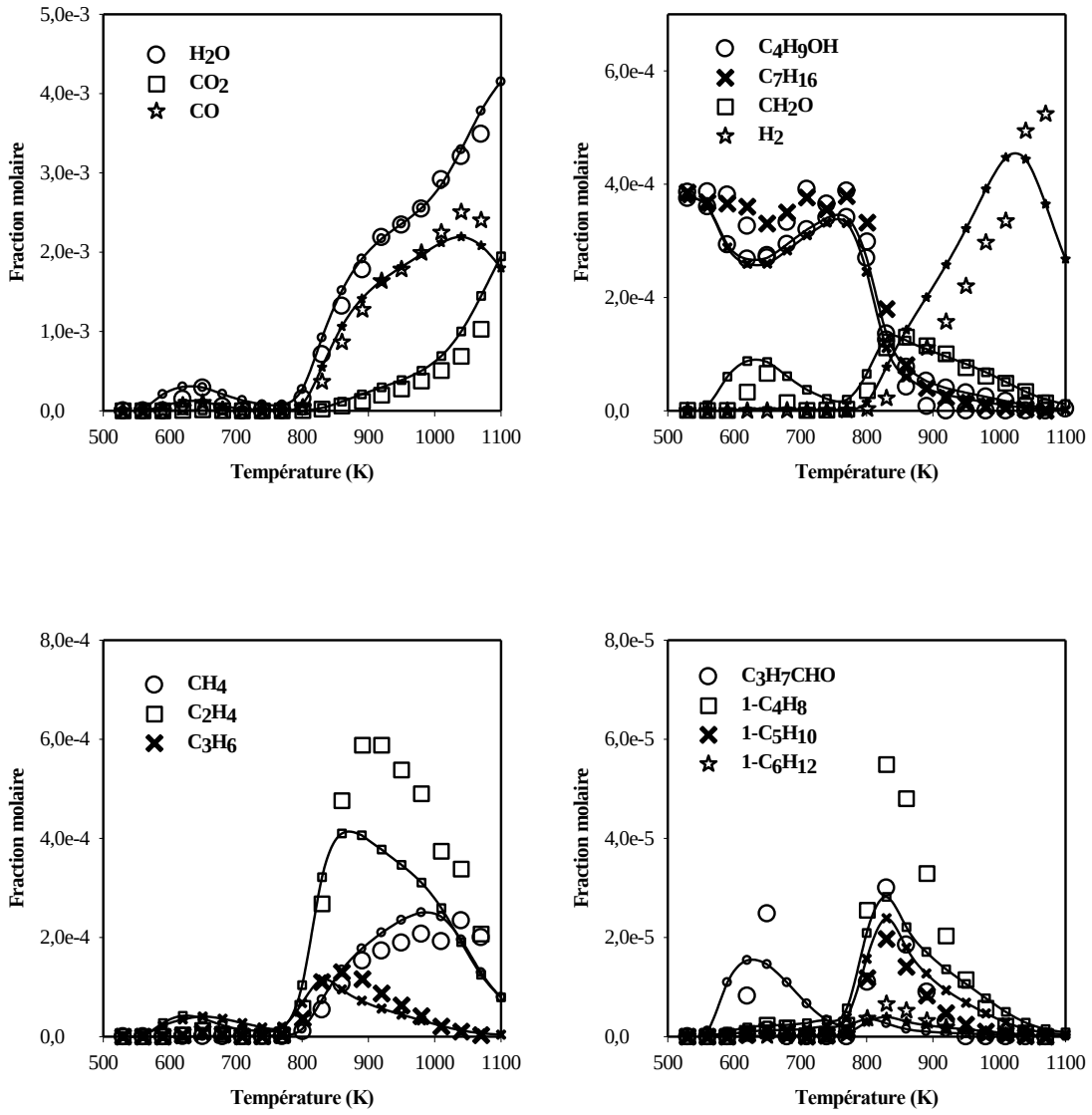


Figure VI-66 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange butan-1-ol/n-heptane 50-50 % molaire en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 et τ=0,7 s

c) Comparaison de la vitesse d'oxydation du butan-1-ol et du n-heptane dans le mélange butan-1-ol/n-heptane

Sur la figure VI-67, sont représentées les vitesses de consommation du butan-1-ol et du n-heptane dans les mélanges étudiés. On peut observer que les deux vitesses de consommation sont très similaires dans le cas du mélange molaire composé à 50% de butan-1-ol et 50% de n-heptane. Concernant le mélange molaire composé à 20% de butan-1-ol et 80% de n-heptane, la vitesse de consommation du n-heptane est largement supérieure à celle du butan-1-ol. Dans ces deux mélanges, le n-heptane a un effet promoteur sur l'oxydation du butan-1-ol, en particulier à basse température, où le butan-1-ol ne réagit pas lorsqu'il est étudié seul.

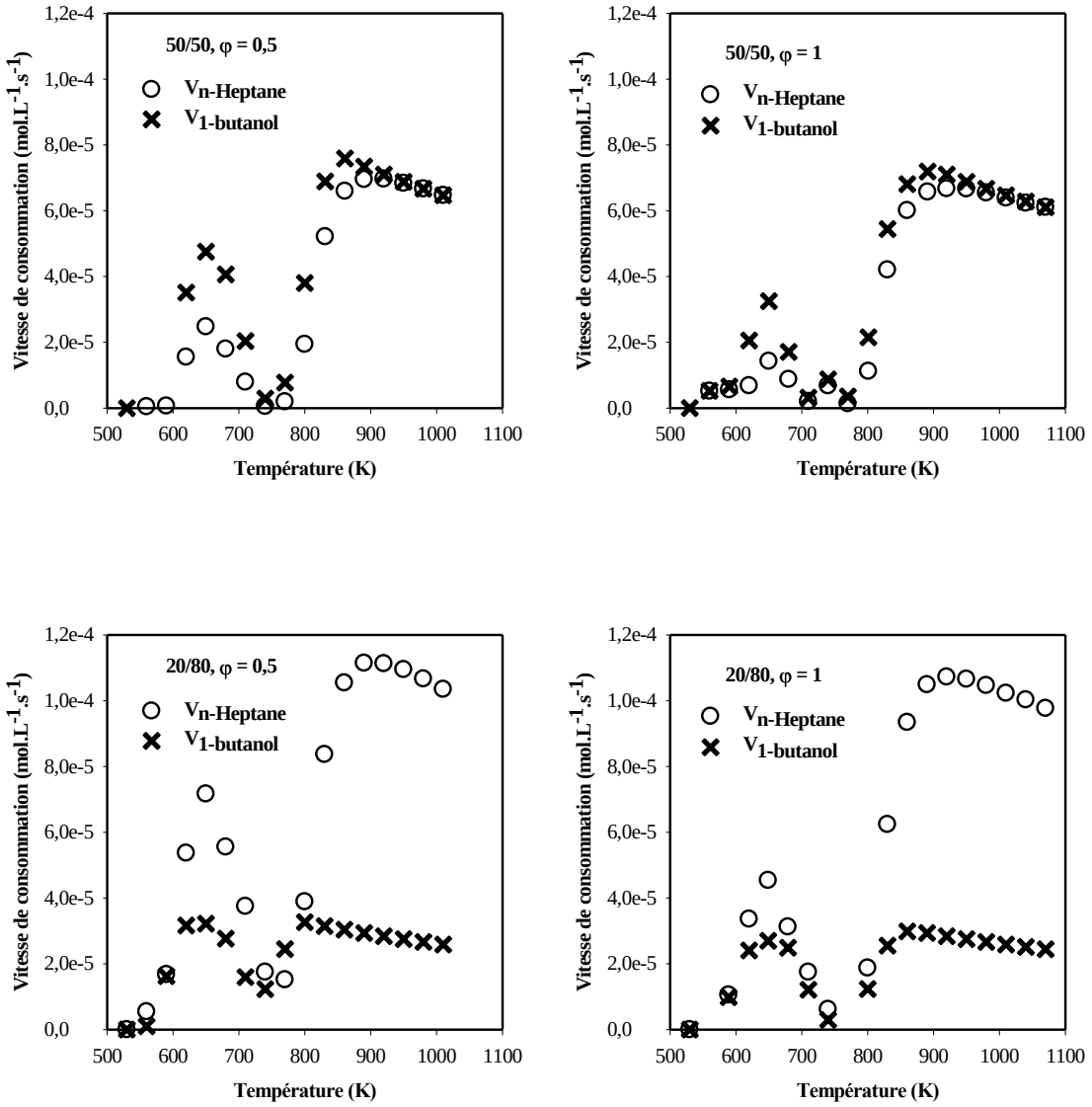


Figure VI-67 : Evolution en fonction de la température des vitesses de consommation du butan-1-ol et du n-heptane dans les mélanges en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7s)

d) Comparaison de la vitesse d'oxydation de l'éthanol et du butan-1-ol dans les

mélanges alcools/n-heptane

La figure VI-68 présente une comparaison des vitesses de consommation de l'éthanol et du butan-1-ol en fonction de la température dans les mélanges éthanol/n-heptane et butan-1-ol/n-heptane. Il apparaît que le butan-1-ol est plus réactif que l'éthanol dans les mélanges. Cela peut s'expliquer par la formation de radicaux qui vont facilement réagir. Par ailleurs, la longue chaîne carbonée du butan-1-ol peut également justifier sa consommation rapide.

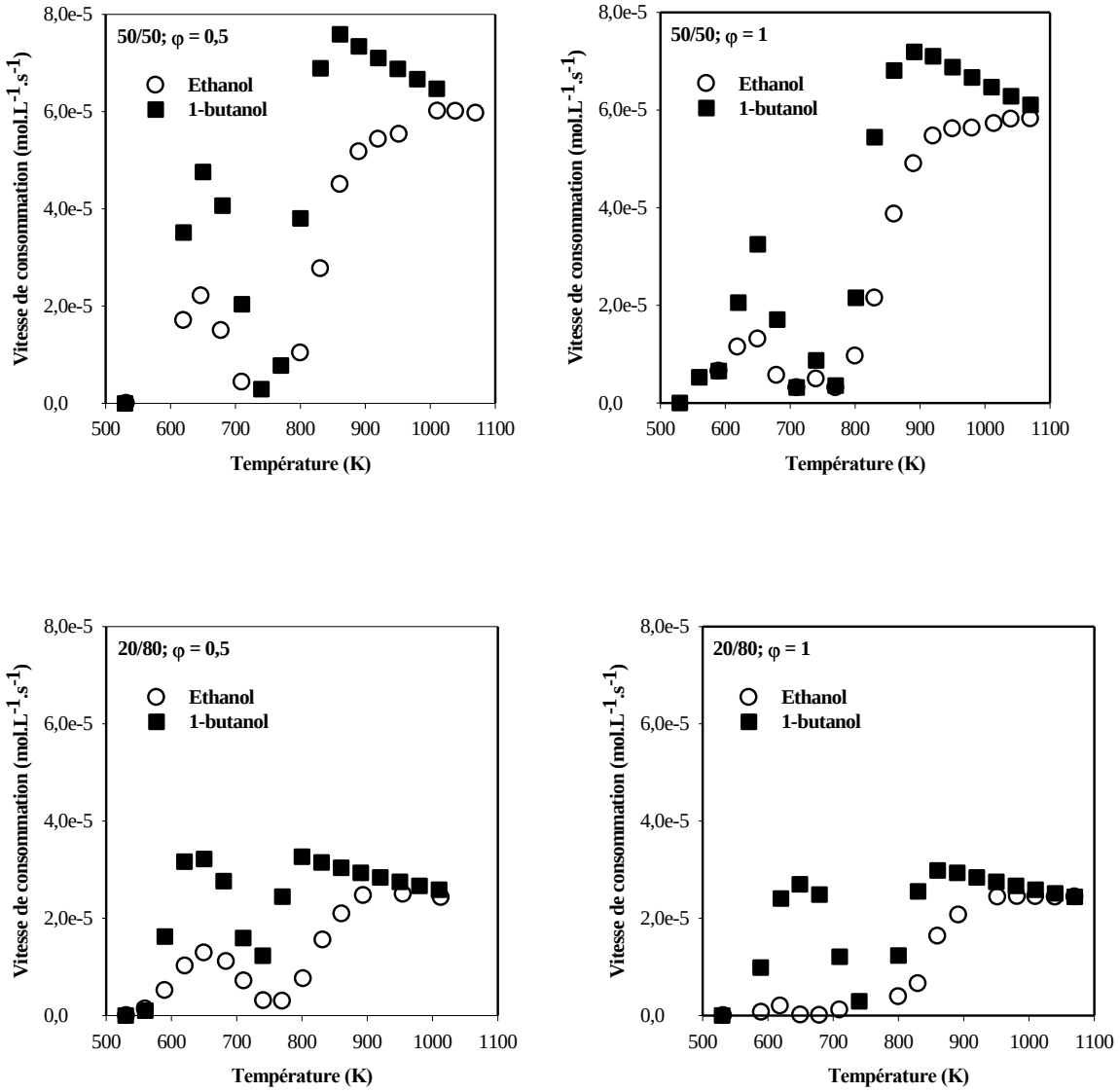


Figure VI-68 : Evolution en fonction de la température des vitesses de consommation de l'éthanol et du butan-1-ol dans les mélanges alcools/n-heptane en réacteur auto-agité (P=10 atm ; τ=0,7s)

Conclusion

Nous avons étudié en réacteur auto-agité l'oxydation de plusieurs alcools : méthanol, éthanol, butan-1-ol, pentan-1-ol et hexan-1-ol. Les expériences ont été réalisées à haute pression (10 atm) et dans un large domaine de température (530-1220 K). Les profils des fractions molaires des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables ont été déterminés. A l'issue de l'étude de l'oxydation des alcools purs, nous avons également étudié l'oxydation de divers mélanges n-heptane/alcool et alcool/essence (l'essence utilisée est un mélange ternaire isooctane/hex-1-ène/toluène.

L'ensemble de ces résultats nous a permis de tester et de valider les modèles cinétiques d'oxydation développés au laboratoire de ces alcools et des mélanges alcools/ « surrogates » essence proposé par Yahyaoui et al [15]. Les profils simulés se sont ainsi révélés prédire correctement les résultats expérimentaux, même si les sous-mécanismes du pentan-1-ol et du hexan-1-ol nécessitent des améliorations.

Pour les composés purs, les analyses de vitesse ont permis de mettre en évidence les principales voies de formation des espèces stables identifiées. Les alcools réagissent tous par des réactions de métathèse pour former différents radicaux (dont principalement celui dont le site radicalaire est porté par l'atome de carbone lié à l'atome d'oxygène) qui sont ensuite dégradés par diverses voies : oxydation, isomérisation, rupture de liaisons C-C et C-H.

Enfin des analyses de sensibilité ont permis de déterminer les réactions les plus influentes. Pour ces composés, la vitesse de consommation des alcools est très sensible aux réactions de métathèse avec les radicaux OH et HO_2 et aux réactions de la base C_0-C_2, en particulier celles impliquant ces mêmes radicaux. Les mêmes résultats ont été obtenus lors de l'oxydation des mélanges.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. K. Owen and T. Coley

   Automotive Fuels Reference Book - Second Edition. 1995, Warrendale, PA (USA): Society of Automotive Engineers (SAE International). 976.

2. J. C. Guibet

   Fuels and Engines. Technology - Energy - Environment, ed. E. Technip. 1999, Paris: Editions Technip.

3. K. A. Vogt, D. J. Vogt, T. Patel-Weynand, R. Upadhye, D. Edlund, R. L. Edmonds, J. C. Gordon, A. S. Suntana, R. Sigurdardottir, M. Miller, P. A. Roads and G. M. Andreu

   Bio-methanol: How energy choices in the western United States can help mitigate global climate change. Renewable Energy, 2009. **34**(1): p. 233-241.

4. G. A. Olah

   Beyond oil and gas: The methanol economy. Angewandte Chemie-International Edition, 2005. **44**(18): p. 2636-2639.

5. R. J. Nichols

   The methanol story: A sustainable fuel for the future. Journal of Scientific & Industrial Research, 2003. **62** (1-2): p. 97-105.

6. T. J. Wallington, P. Dagaut and M.J. Kurylo

   Correlation between Gas-Phase and Solution-Phase Reactivities of Hydroxyl Radicals toward Saturated Organic-Compounds. Journal of Physical Chemistry, 1988. **92** (17): p. 5024-5028.

7. G. Dayma, K. Hadj Ali and P. Dagaut

   Experimental and detailed kinetic modeling study of the high pressure oxidation of methanol sensitized by nitric oxide and nitrogen dioxide. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 411-418.

8. F. N. Egolfopoulos, D.X. Du and C.K. Law

   A Comprehensive Study of Methanol Kinetics in Freely-Propagating and Burner-Stabilized Flames, Flow and Static Reactors, and Shock-Tubes. Combustion Science and Technology, 1992. **83** (1-3): p. 33-75.

9. N. Leplat, A. Seydi and J. Vandooren

   An Experimental Study of the Structure of a Stoichiometric Ethanol/Oxygen/Argon Flame. Combustion Science and Technology, 2008. **180** (3): p. 519-532.

10. P. Saxena and F.A. Williams

Numerical and experimental studies of ethanol flames. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(1): p. 1149-1156.

11. F. M. Haas, M. Chaos and F.L. Dryer

Low and intermediate temperature oxidation of ethanol and ethanol-PRF blends: An experimental and modeling study. Combustion and Flame, 2009. **156**(12): p. 2346-2350.

12. J. T. Moss, A. M. Berkowitz, M. A. Oehlschlaeger, J. Biet, V. Warth, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc

An Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of the Four Isomers of Butanol. Journal of Physical Chemistry A, 2008. **112** (43): p. 10843-10855.

13. J. M. Simmie

Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels. Progress in Energy and Combustion Science, 2003. **29** (6): p. 599-634.

14. P. Dagaut, R. Koch and M. Cathonnet

The oxidation of n-heptane in the presence of oxygenated octane improvers: MTBE and ETBE. Combustion Science and Technology, 1997. **122**(1-6): p. 345-361.

15. M. Yahyaoui, N. Djebaili-Chaumeix, P. Dagaut, C. E. Paillard and S. Gail

Experimental and modelling study of gasoline surrogate mixtures oxidation in jet stirred reactor and shock tube. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31**(1): p. 385-391.

16. P. Dagaut, M. Reuillon and M. Cathonnet

High-Pressure Oxidation of Liquid Fuels from Low to High-Temperature .2. Mixtures of N-Heptane and Isooctane. Combustion Science and Technology, 1994. **103**(1-6): p. 315-336.

17. Y. Tan, P. Dagaut, M. Cathonnet and J. C. Boettner

Oxidation and Ignition of Methane-Propane and Methane-Ethane-Propane Mixtures - Experiments and Modeling. Combustion Science and Technology, 1994. **103**(1-6): p. 133-151.

18. K. Mati, A. Ristori, S. Gail, G. Pengloan, P. Dagaut

The oxidation of a diesel fuel at 1-10 atm: Experimental study in a JSR and detailed chemical kinetic modeling. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (2): p. 2939-2946.

19. P. Diévart

Oxydation et combustion en milieu ultra-pauvre de carburants types gazoles. Etude expérimentale en réacteur agité et modélisation, Thèse, Université de Lille 1, 2008

20. P. Dagaut and M. Cathonnet

The ignition, oxidation, and combustion of kerosene: A review of experimental and kinetic modeling. Progress in Energy and Combustion Science, 2006. **32**(1): p. 48-92.

21. P. Dagaut A. El Bakali and A. Ristori

The combustion of kerosene: Experimental results and kinetic modelling using 1- to 3-component surrogate model fuels. Fuel, 2006. **85**(7-8): p. 944-956.

22. P. Dagaut and S. Gail

Chemical kinetic study of the effect of a biofuel additive on Jet-A1 combustion. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111** (19): p. 3992-4000.

VII

Conclusions et perspectives

Sommaire

VII. Conclusion générale et perspectives.....307

VII. Conclusion générale et perspectives

Les objectifs de ce travail de thèse étaient (i) d'étudier la cinétique d'oxydation de basse et haute température d'esters méthyliques saturés et insaturés (du butanoate de méthyle au décanoate de méthyle), ceci afin de disposer d'une base importante de données et également de faciliter la compréhension de l'influence de la fonction ester et de l'insaturation sur l'oxydation de ces composés ; (ii) d'étudier la cinétique d'oxydation d'alcools utilisables comme constituant de carburants ; (iii) de construire et valider un modèle cinétique détaillé pour l'oxydation de ces composés organiques.

La première étape de ce travail a donc été l'étude expérimentale de l'oxydation de constituants de biocarburants et de composés modèles purs, et de mélanges. Les études ont été réalisées au moyen d'un réacteur auto-agité par jets gazeux à pression et temps de passage constants. Ces expériences sont rappelées dans le tableau VII-1 pour les composés purs et dans le tableau VII-2 pour les mélanges.

Composé	Structure	Pression (atm)	Richesse	Temps de passage (s)	% initial d'esters	Température (K)
Butanoate de méthyle		10	0,3-0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	770-1100
Propanoate d'éthyle		10	0,3-0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	770-1100
Pentanoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1160
Hexanoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1160
Hex-3-énoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1160
Heptanoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1160
Octanoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200

Oct-2-énoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200
Nonanoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200
Non-2-énoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200
Non-3-énoate de méthyle		10	0,6-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200
Decanaote de méthyle		10	0,5-1,0-2,0	0,7	0,1	560-1200

Tableau VII-1a : Récapitulatif des expériences réalisées en réacteur auto-agité pour l'oxydation des esters purs

Composé	Structure	Pression (atm)	Richesse	Temps de passage (s)	X_{HC} initial	Température (K)
méthanol	$H_3C—OH$	10	1,00	0,7	4.10^{-3}	770-1160
éthanol		10	0,25-4,00	0,7	2.10^{-3}	770-1250
Butan-1-ol		10	0,25-4,0	0,7	1.10^{-3}	770-1250
Butan-2-ol		10	0,275-4,000	0,7	1.10^{-3}	770-1250
Iso-butanol		10	0,275-4,000	0,7	1.10^{-3}	770-1250
Pentan-1-ol		10	0,35-4,00	0,7	1.10^{-3} ; $1,5.10^{-3}$	770-1250
Hexan-1-ol		10	0,50-4,00	0,7	1.10^{-3} ; $1,5.10^{-3}$	560-1250

Tableau VII-1b : Récapitulatif des expériences réalisées en réacteur auto-agité pour l'oxydation des alcools purs

Mélange	Pression (atm)	Richesse	Temps de passage (s)	X_{HC} initial	Température (K)
méthanol/essence*	10	0,35-2,00	0,7	4.10^{-3}	770-1200
éthanol/essence* 85/15 (volume/volume)	10	0,30-2,00	0,7	2.10^{-3}	770-1220
éthanol/n-heptane 20/80 et 50/50 (mole/mole)	10	0,50-1,00	0,7	$7,5.10^{-4}$	530-1100
butan-1-ol/essence* 85/15 (volume/volume)	10	0,30-2,00	0,7	1.10^{-3}	770-1220
butan-1-ol/n-heptane 20/80 et 50/50 (mole/mole)	10	0,50-1,00	0,7	$7,5.10^{-4}$	530-1220

* : l'essence est représentée par un mélange ternaire isooctane/hex-1-ène/toluène.

Tableau VII-2 : Récapitulatif des expériences réalisées en réacteur auto-agité pour l'oxydation de mélanges de carburants

L'analyse des différents gaz de combustion par spectrométrie infrarouge (IRTF) et par chromatographie en phase gazeuse (CPG-TCD-MS) a permis d'identifier les produits de réaction et d'obtenir les profils de concentration en fonction de la température pour les réactifs, les produits et les principaux intermédiaires stables.

L'oxydation des esters méthyliques saturés a révélé une absence de réactivité à basse température dans nos conditions expérimentales pour les composés à chaîne alkylique courte, à savoir le butanoate de méthyle et le pentanoate de méthyle. Mais pour les esters méthyliques à chaîne alkylique longue (nombre d'atomes de carbone supérieur ou égal à 6), une réactivité a été observée à basse température. Une flamme froide, localisée entre 560 et 770 K, se développe ; elle diminue d'intensité dans la zone du coefficient négatif de température (650-770 K). L'amplitude de la flamme froide augmente avec la longueur de la chaîne alkylique. Au-delà de 770 K, la réactivité des mélanges étudiés augmente de nouveau. Cette zone qualifiée de zone de haute température, se caractérise par une production importante de CO, CO_2, CH_2O, CH_4, C_2H_4 et C_3H_6.

L'oxydation des esters méthyliques insaturés présente le même comportement que celui observé lors de l'oxydation des esters méthyliques saturés. Néanmoins, l'oxydation de ces esters insaturés se caractérise par une faible amplitude de la flamme froide, ce qui se traduit par une réactivité entre 530 et 770 K plus faible que pour les esters saturés correspondants. L'effet « inhibiteur » de la double liaison sur l'oxydation de l'ester a été ainsi mis en évidence. Cet effet est beaucoup plus

important à basse température qu'à haute température.

Nous avons également pu comparer l'oxydation des esters méthyliques à celle des alcanes. Nous avons alors observé une similitude entre les réactivités à basse et haute température de ces deux familles de composés, principalement ceux à chaîne alkylique longue. La comparaison des fractions molaires des espèces formées a montré que les quantités d'hydrocarbures (CH_4, C_2H_4, C_3H_6, 1-alcènes, 1,3-C_4H_6 et C_2H_2) mesurées lors de l'oxydation des alcanes sont légèrement plus élevées que celle obtenues avec les esters méthyliques. Les quantités de formaldéhyde et d'acétaldéhyde sont très proches, même si à basse température les alcanes en forment un peu plus.

L'oxydation des alcools étudiés (méthanol, éthanol, butan-1-ol, pentan-1-ol et hexan-1-ol) a montré également une absence de réactivité à basse température (500-770 K), à l'exception de l'hexan-1-ol qui se singularise par l'apparition d'une faible flamme froide. Les principales espèces détectées sont CO, CO_2, CH_2O, CH_4, et C_2H_4.

L'étude de l'oxydation des différents mélanges de carburants n'a pas révélé particulièrement la présence de nouvelles espèces intermédiaires, autres que celles produites par les composés purs. Cependant, l'oxydation de ces mélanges (éthanol/n-heptane, butan-1-ol/n-heptane) a montré que l'éthanol et le butan-1-ol peuvent être oxydés à basse température, contrairement à ce qui a été observé lorsqu'ils sont oxydés seuls. La présence de n-heptane agit comme un promoteur d'oxydation par production de petits radicaux (OH, HO_2, etc.) initiant l'oxydation de l'éthanol et du butan-1-ol à basse température. Les mêmes résultats et les mêmes conclusions sont obtenus en étudiant l'oxydation des mélanges éthanol/octanoate de méthyle et butan-1-ol/octanoate de méthyle dont les graphes sont présentés en Annexe 2.

Dans la deuxième partie de ce travail, les résultats expérimentaux obtenus pour l'oxydation de chaque composé pur et des mélanges ont été modélisés au moyen de mécanismes cinétiques détaillés et des données thermodynamiques des espèces chimiques mises en jeu. Chaque modèle a été validé à 10 atmosphères par confrontation des fractions molaires mesurées expérimentalement avec nos simulations.

Le modèle cinétique d'oxydation des esters méthyliques à chaîne alkylique saturée trouve ses origines dans le mécanisme cinétique proposé par Dayma et al. sur l'oxydation de l'hexanoate de méthyle [1]. La base réactionnelle C_0-C_4 initiale a été remplacée par celle issue des travaux de Le Cong [2] et de Dagaut et al.[3], les paramètres cinétiques de certaines de ces réactions ayant été réévalués. Nous avons ensuite greffé à cette base les différents sous-mécanismes d'oxydation des esters méthyliques en partant du butanoate de méthyle jusqu'au décanoate de méthyle. Le mécanisme cinétique obtenu est constitué de 1839 espèces et 7783 réactions, majoritairement réversibles. Il a été testé par simulation de nos expériences menées en réacteur auto-agité. Le modèle simule convenablement la plupart des fractions molaires mesurées. Néanmoins, des désaccords existent, et les plus importants sont observés dans les cas du nonanoate de méthyle et du décanoate de méthyle, notamment en milieu riche. Pour le moment, ces désaccords entre les simulations et les résultats expérimentaux n'ont pu être résolus.

Les sous-mécanismes d'oxydation du méthanol [2, 4] et de l'éthanol [2, 5] ont déjà été développés précédemment au laboratoire. Ainsi, nous avons amélioré ces sous-mécanismes en réajustant les constantes de vitesse notamment celles impliquant l'éthanol. Les nouvelles constantes utilisées sont issues des travaux de Park et al.[6], de Xu et Lin [7], de Xu et al. [8] et de Wu et al.

[9] pour les réactions de métathèse de l'éthanol avec respectivement les radicaux H, OH, CH3 et O. L'accord entre les prévisions du modèle et les résultats expérimentaux, est globalement satisfaisant.

Le modèle cinétique d'oxydation du butan-1-ol est basé sur les travaux de Dagaut et al. [10]. Le modèle simule correctement la plupart des fractions molaires des espèces identifiées.

Les modèles cinétiques du pentan-1-ol et de l'hexan-1-ol ont été développés sur les mêmes bases que celui du butan-1-ol. Ces mécanismes reproduisent convenablement les résultats expérimentaux, malgré quelques désaccords sur certains composés (C_2H_4, C_3H_6, pentanal, et hexanal).

Les cinétiques d'oxydation du butan-2-ol et de l'iso-butanol ont été simulées en utilisant un mécanisme publié par Moss et al.[11] qui s'est montré peu prédictif. Nos simulations ont montré que la cinétique de réactions de H avec ces alcools devrait être reconsidérées.

Les mécanismes développés dans cette étude fournissent des résultats satisfaisants, mais nécessitent tout de même des améliorations. Ainsi, afin d'améliorer les prédictions du modèle, en particulier le modèle d'oxydation des esters méthyliques, il serait judicieux de le tester dans d'autres conditions expérimentales (tube à choc, machine à compression rapide, flamme). Les méthodes d'estimation des constantes de vitesse de certaines réactions (isomérisations, décompositions) devront être revues et améliorées. L'utilisation d'outils de chimie quantique devrait nous y aider.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. G. Dayma, S. Gail and P. Dagaut

   Experimental and kinetic modeling study of the oxidation of methyl hexanoate. Energy and Fuels, 2008. **22** (3): p. 1469-1479.

2. T. Le Cong

   Etude 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, 2007

3. P. Dagaut

   On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002. **4** (11): p. 2079-2094.

4. G. Dayma, K. Hadj Ali and P. Dagaut

   Experimental and detailed kinetic modeling study of the high pressure oxidation of methanol sensitized by nitric oxide and nitrogen dioxide. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 411-418.

5. P. Dagaut, J.C. Boettner and M. Cathonnet

   Kinetic Modeling of Ethanol Pyrolysis and Combustion. Journal de Chimie Physique et De Physico-Chimie Biologique, 1992. **89** (4): p. 867-884.

6. J. Park, Z.F. Xu and M.C. Lin

   Thermal decomposition of ethanol. II. A computational study of the kinetics and mechanism for the H + C[sub 2]H[sub 5]OH reaction. The Journal of Chemical Physics, 2003. **118** (22): p. 9990-9996.

7. S. Xu and M.C. Lin

   Theoretical study on the kinetics for OH reactions with CH3OH and C2H5OH. Proceedings of the Combustion Institute, 2007. **31** (1): p. 159-166.

8. Z. F. Xu, J. Park and M.C. Lin

   Thermal decomposition of ethanol. III. A computational study of the kinetics and mechanism for the CH[sub 3] + C[sub 2]H[sub 5]OH reaction. The Journal of Chemical Physics, 2004. **120** (14): p. 6593-6599.

9. C. W. Wu, Y. P. Lee, S. C. Xu and M. C. Lin

Experimental and theoretical studies of rate coefficients for the reaction O(P-3) plus C2H5OH at high temperatures. Journal of Physical Chemistry A, 2007. **111**(29): p. 6693-6703.

10. 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. **32**: p. 229-237.

11. J. T. Moss, A. M. Berkowitz, M. A. Oehlschlaeger, J. Biet, V. Warth, P.-A. Glaude and F. Battin-Leclerc

An Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of the Four Isomers of Butanol. Journal of Physical Chemistry A, 2008. **112** (43): p. 10843-10855.

Annexes

Annexe A1 : Caractéristiques des analyseurs de gaz employés avec le réacteur auto-agité

Annexe A1-1 : Caractéristiques des différents chromatographes

Trois chromatographes ont été employés pour analyser les gaz de combustion en sortie du réacteur auto-agité et leurs caractéristiques sont présentées dans le tableau A1-1.

Chroma-tographe	**Colonnes**	**Gaz vecteur**	**Programmation de température**	**Détecteur**	**Composés détectés**
Chromato graphe n°1 : Varian 3400	CP-Al2O3/KCl L = 50 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 5 µm	He 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
Chromato graphe n°2 : 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
Chromato graphe n°3 : Varian CP 3800	DB 624 L = 30 m D_{int} = 0,32 mm D_f = 1,80 µm	He 0,7 mL.mn^{-1}	T_i=70°C ti=0 mn v_1=7°C/mn T_1=140°C t_1=12 mn 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

Tableau A1-1 : Caractéristiques des différents chromatographes utilisés

Annexe A1-2 : Caractéristiques du spectroscope IRTF

Le spectroscope utilisé lors de ces expériences est un spectroscope IRTF de modèle Nexus thermo Nicolet. Les paramètres d'acquisition sont résumées dans le tableau A1-2.

	Valeur
Pression de prélèvement	200 mB
Température de la cellule	175-220 °C
Chemin optique	10 m
Balayages	32 scans
Résolution	0,5 cm^{-1}
Vitesse du miroir	0,63 cm/s
Zero filling	0 niveau
Apodisation	Happ-Genzel
Temps d'acquisition	120 secondes

Tableau A1-2 : Paramètres d'acquisition des méthodes IRTF

Annexe A2 : Résultats de simulation complémentaires

Nous avons étudié les oxydations des mélanges éthanol/octanoate de méthyle et butan-1-ol/octanoate de méthyle en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm), dans un large domaine de température (560-1200 K) et de richesse (0,5-2,0). Trois types de mélanges ont été constitués. Le premier mélange étudié est un mélange molaire composé de 10% d'alcool (éthanol ou butan-1-ol) et 90% d'ester (octanoate de méthyle). Le deuxième est constitué en fraction molaire de 20% d'éthanol ou du 1-butanol et de 80% d'octanoate de méthyle. Enfin le troisième mélange est composé en fraction molaire 50% d'éthanol ou du 1-butanol et 50% d'octanoate de méthyle.

Les résultats expérimentaux obtenus ont été simulés à l'aide de mécanismes d'oxydation obtenus en rassemblant les sous-mécanismes d'oxydation d'octanoate de méthyle, d'éthanol et de butan-1-ol.

- Confrontation modèle-expérience en réacteur-agité : mélange octanoate de méthyle/éthanol

Les conditions expérimentales pour le mélange octanoate de méthyle/éthanol sont regroupées dans le tableau A2-1 :

octanoate de méthyle/éthanol (%mole)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$11{,}63.10^{-3}$	$9{,}8762.10^{-1}$	0,5	560-1200
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$5{,}81.10^{-3}$	$9{,}9344.10^{-1}$	1,0	560-1200
80/20	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$15{,}90.10^{-3}$	$9{,}8335.10^{-1}$	0,5	560-1200
80/20	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$7{,}95.10^{-3}$	$9{,}9130.10^{-1}$	1,0	560-1200
90/10	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$8{,}66.10^{-3}$	$9{,}9059.10^{-1}$	1,0	560-1200
90/10	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$4{,}33.10^{-3}$	$9{,}9492.10^{-1}$	2,0	560-1200

Tableau A2-1 : Oxydation du mélange éthanol/octanoate de méthyle en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

Sur les figures A2-1 à A2-6 sont présentées la confrontation entre les prévisions du modèle et

les résultats expérimentaux pour le mélange octanoate de méthyle/éthanol. L'accord observé entre les prévisions du modèle et les résultats expérimentaux sont globalement satisfaisants, même si des améliorations restent encore à apporter au mécanisme.

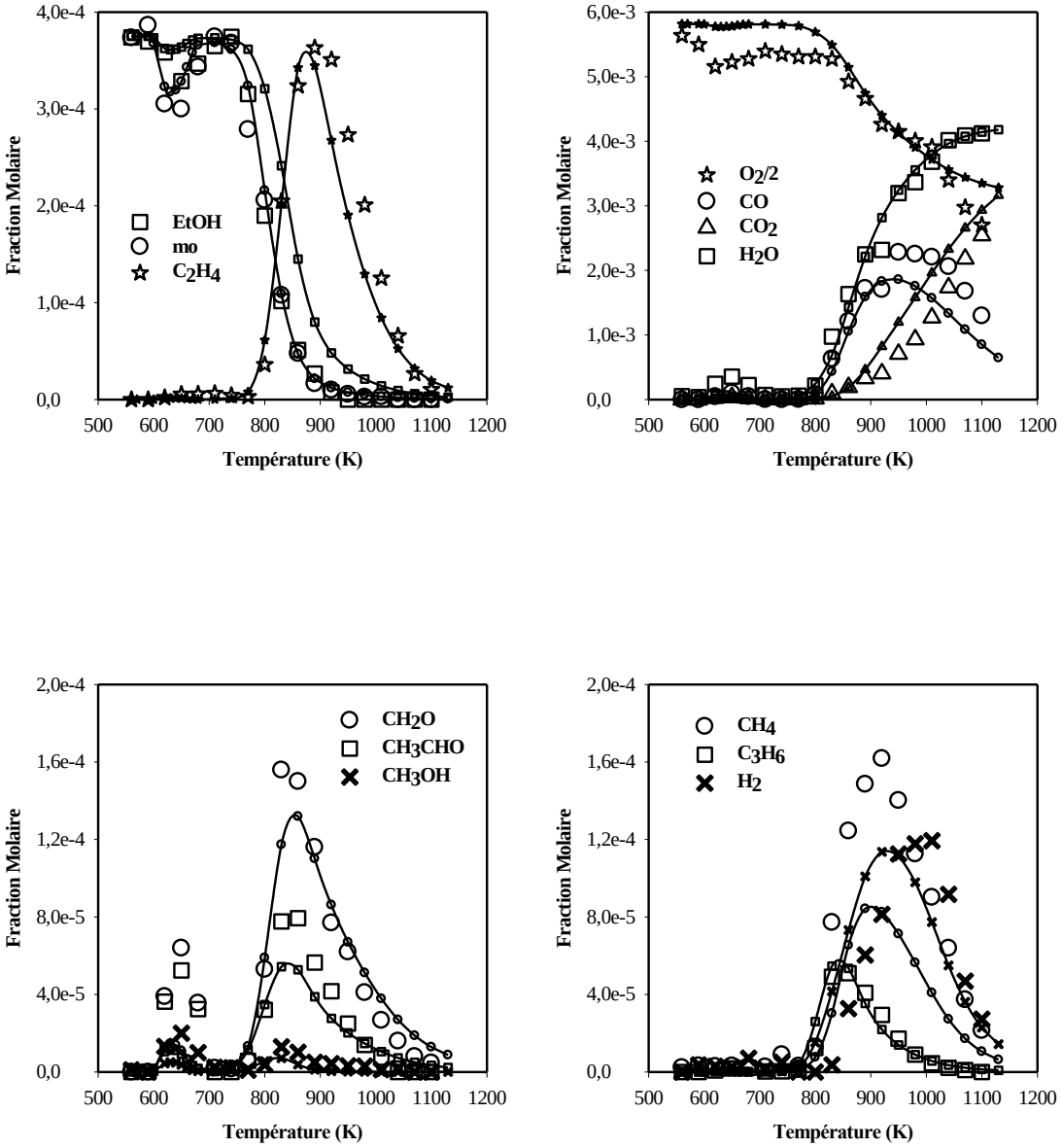


Figure A2-1 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

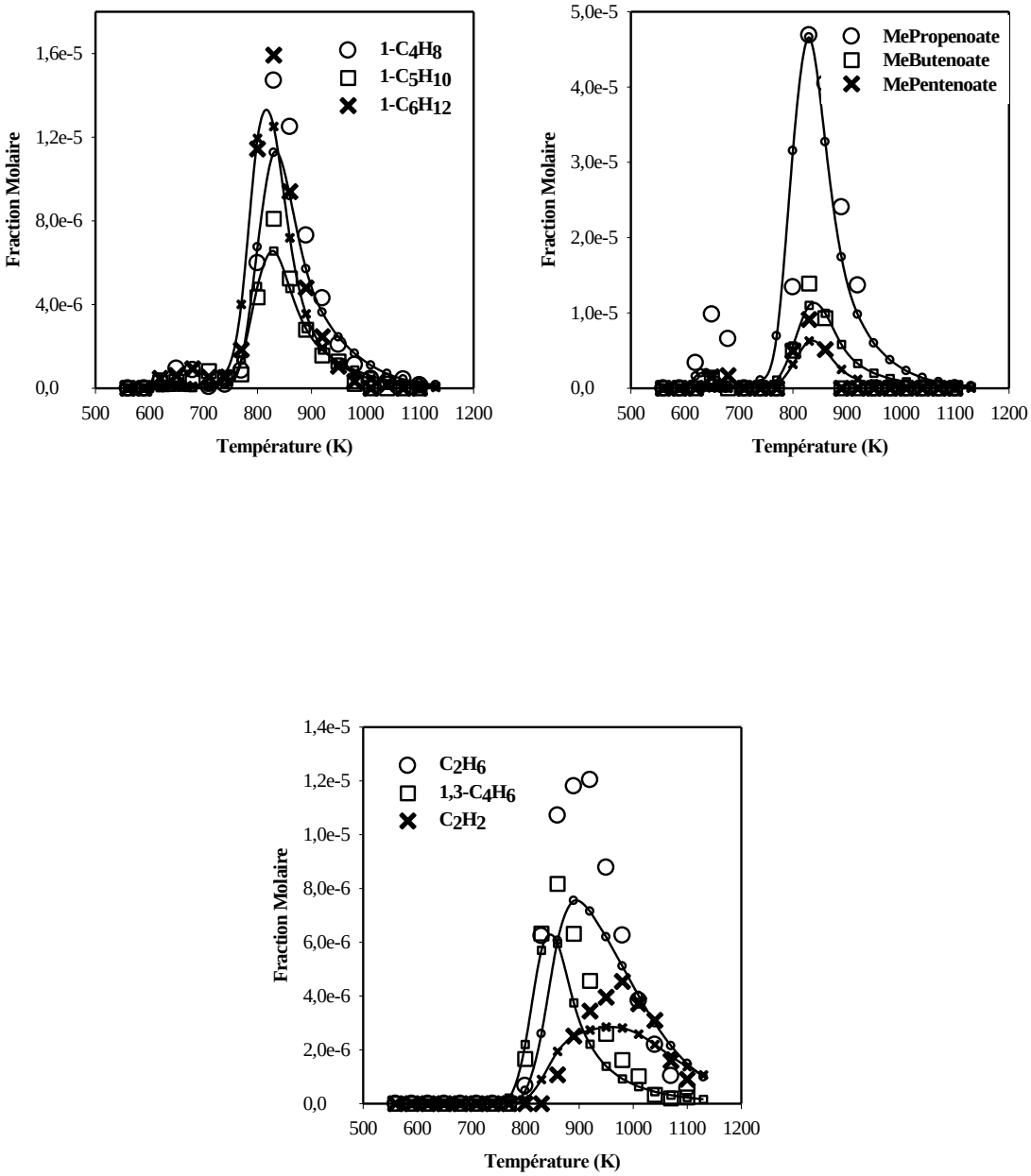


Figure A2-1 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

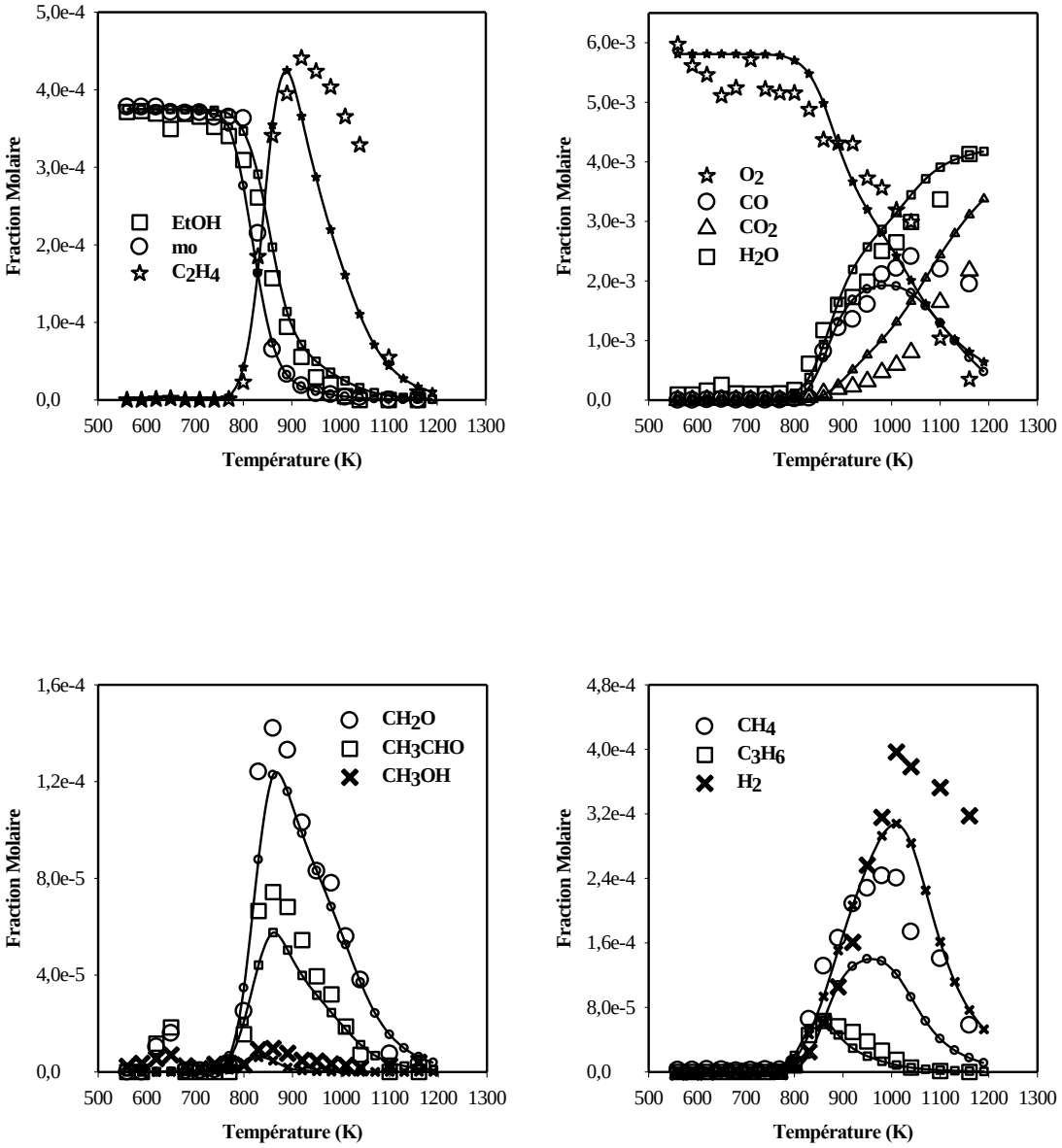


Figure A2-2 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

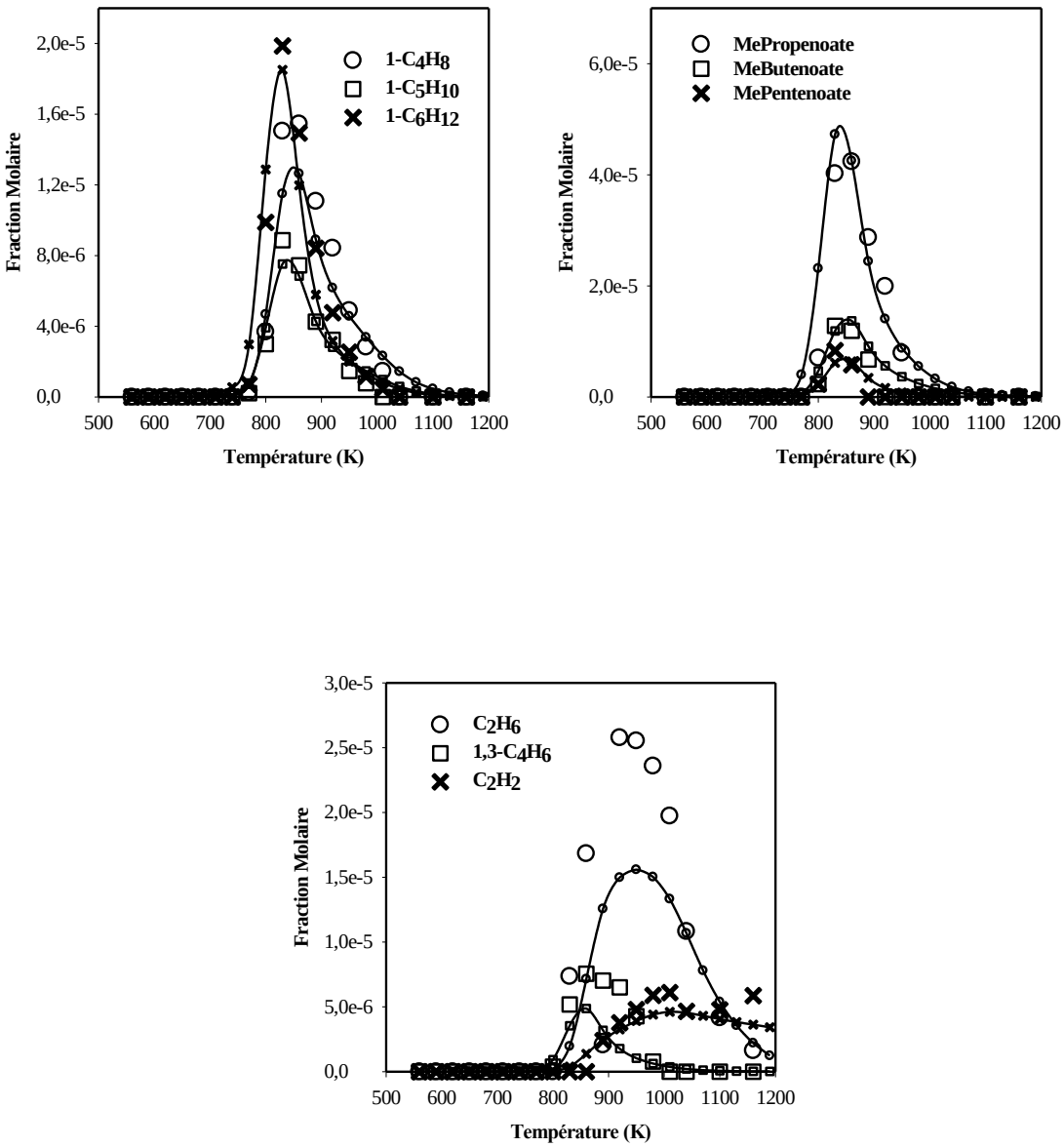


Figure A2-2 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

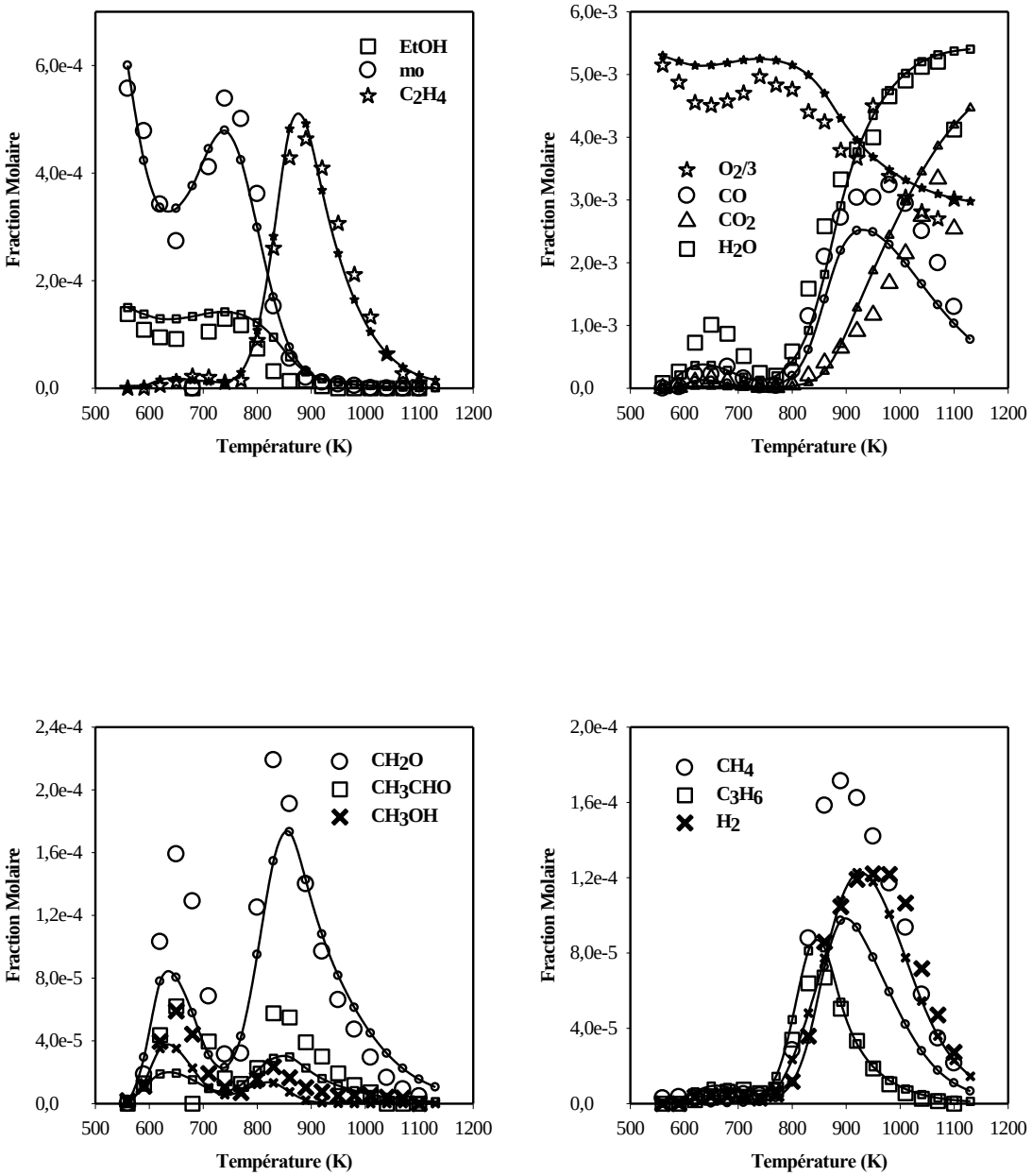


Figure A2-3 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

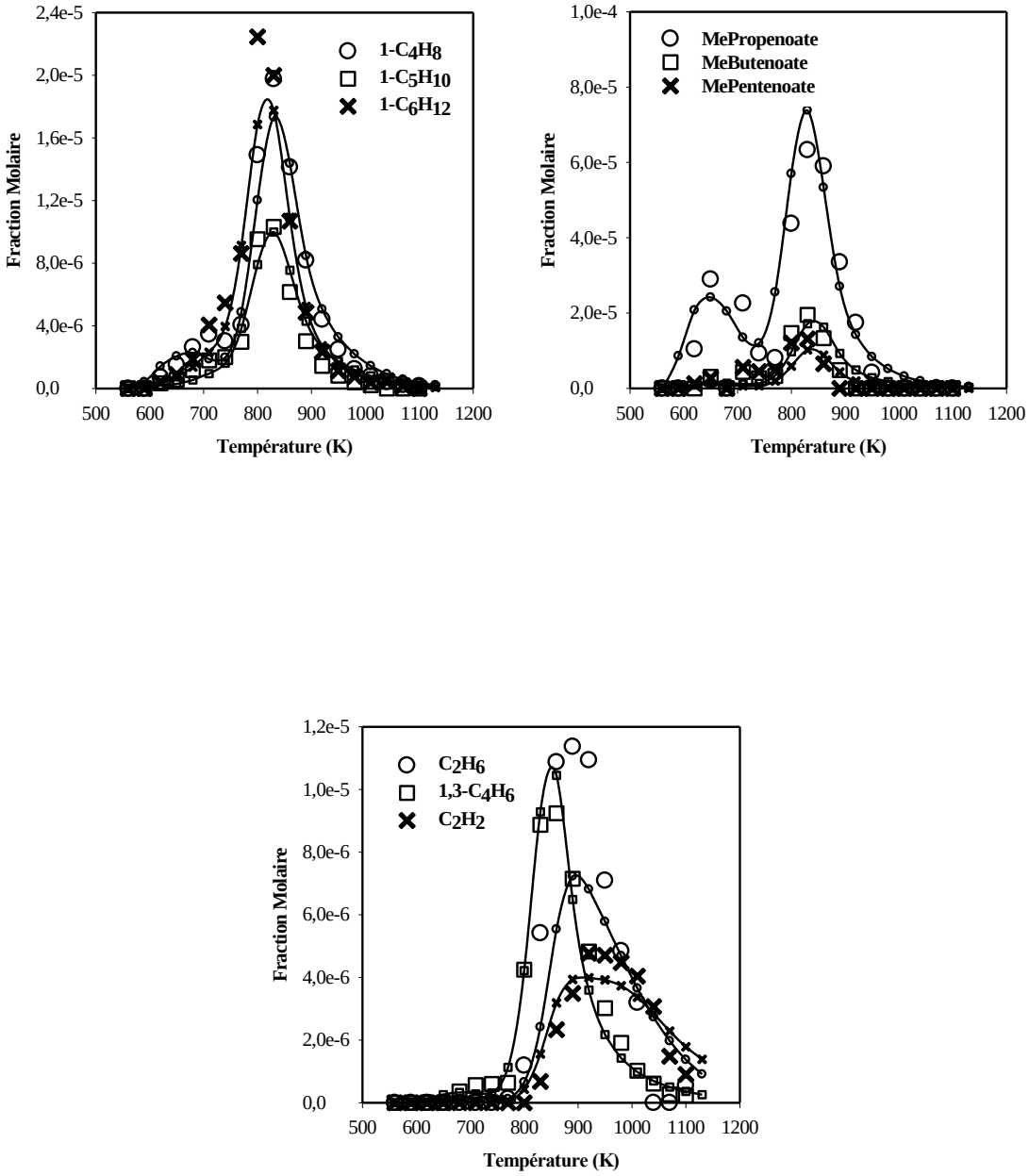


Figure A2-3 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

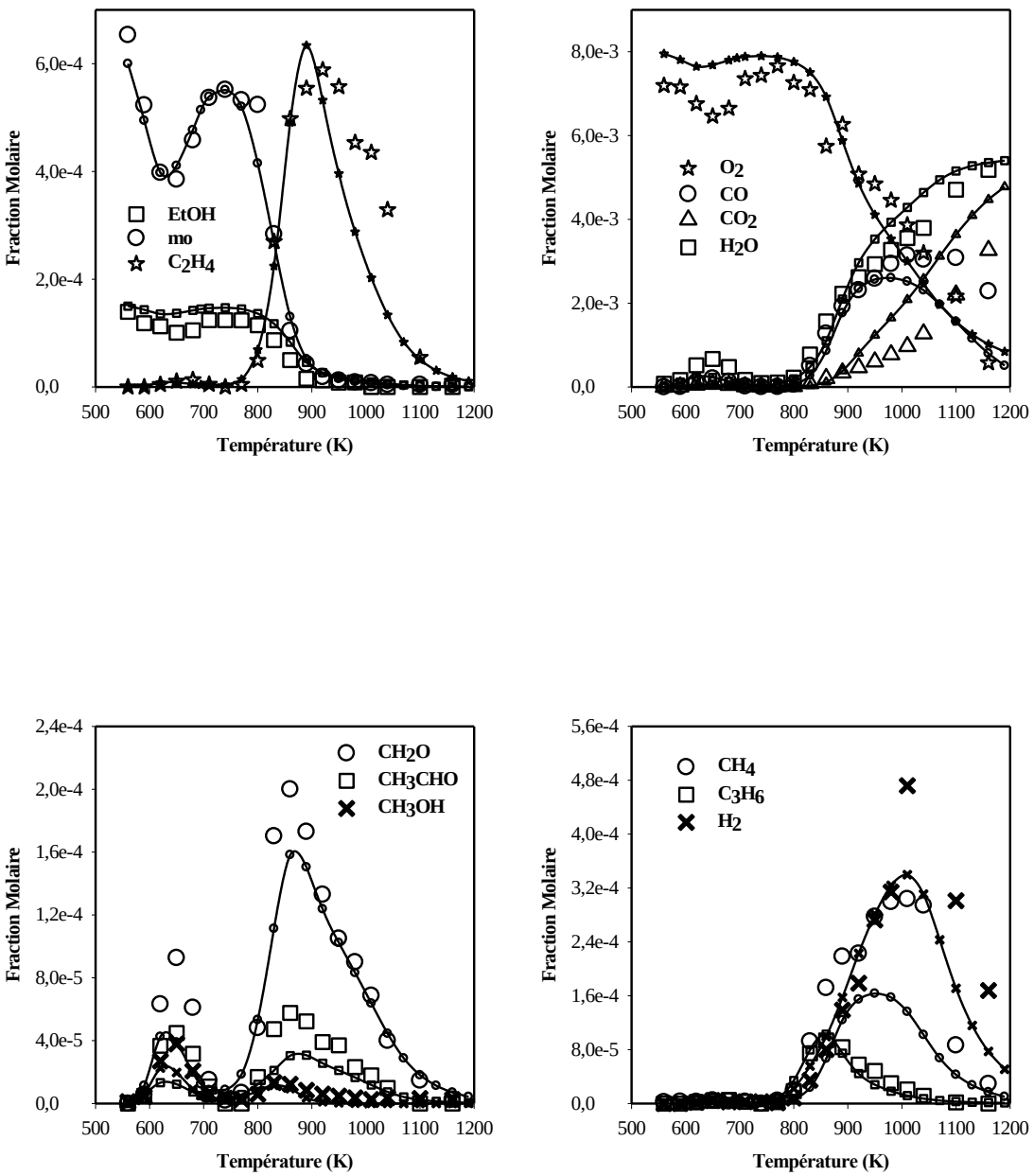


Figure A2-4 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

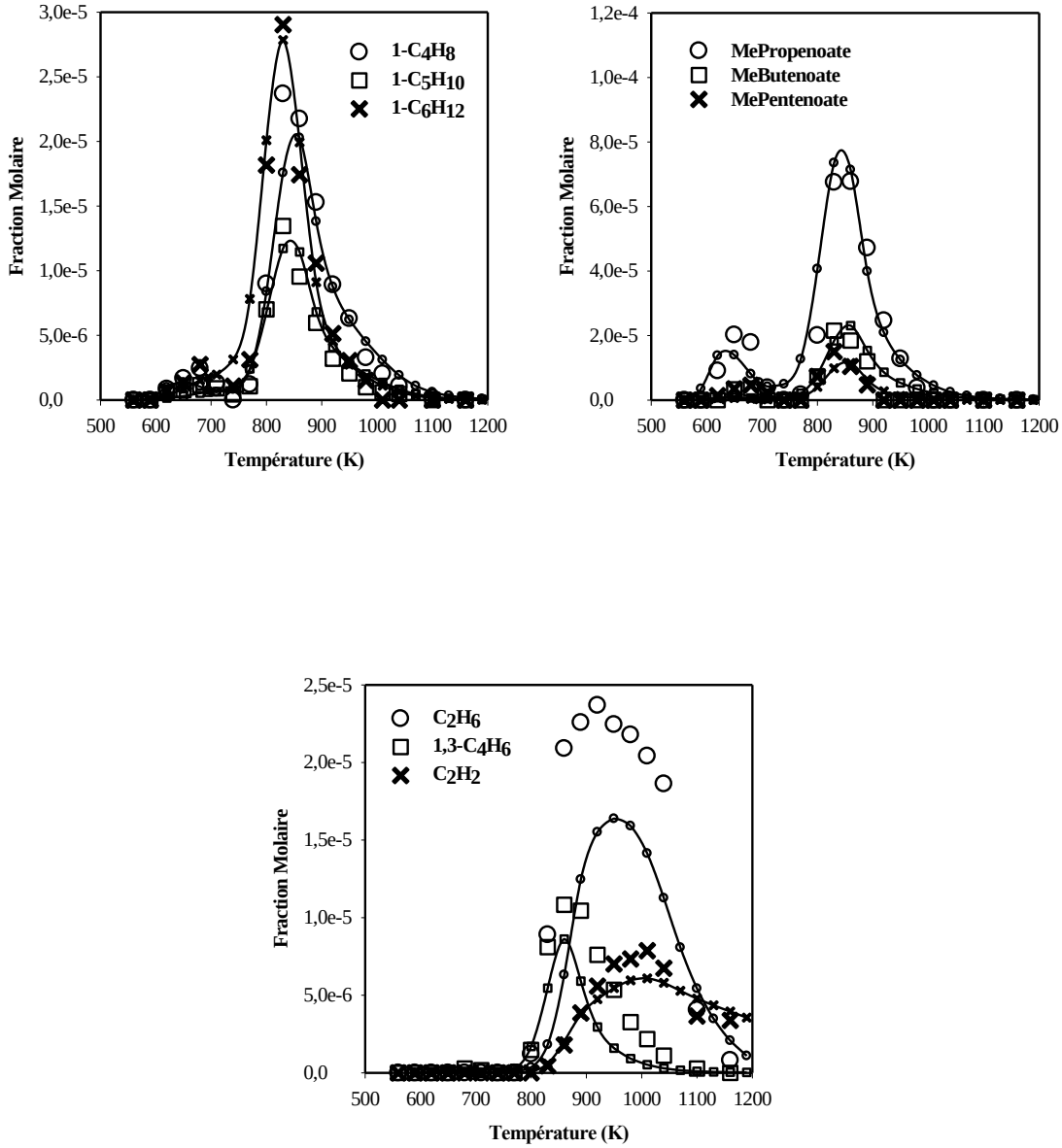


Figure A2-4 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

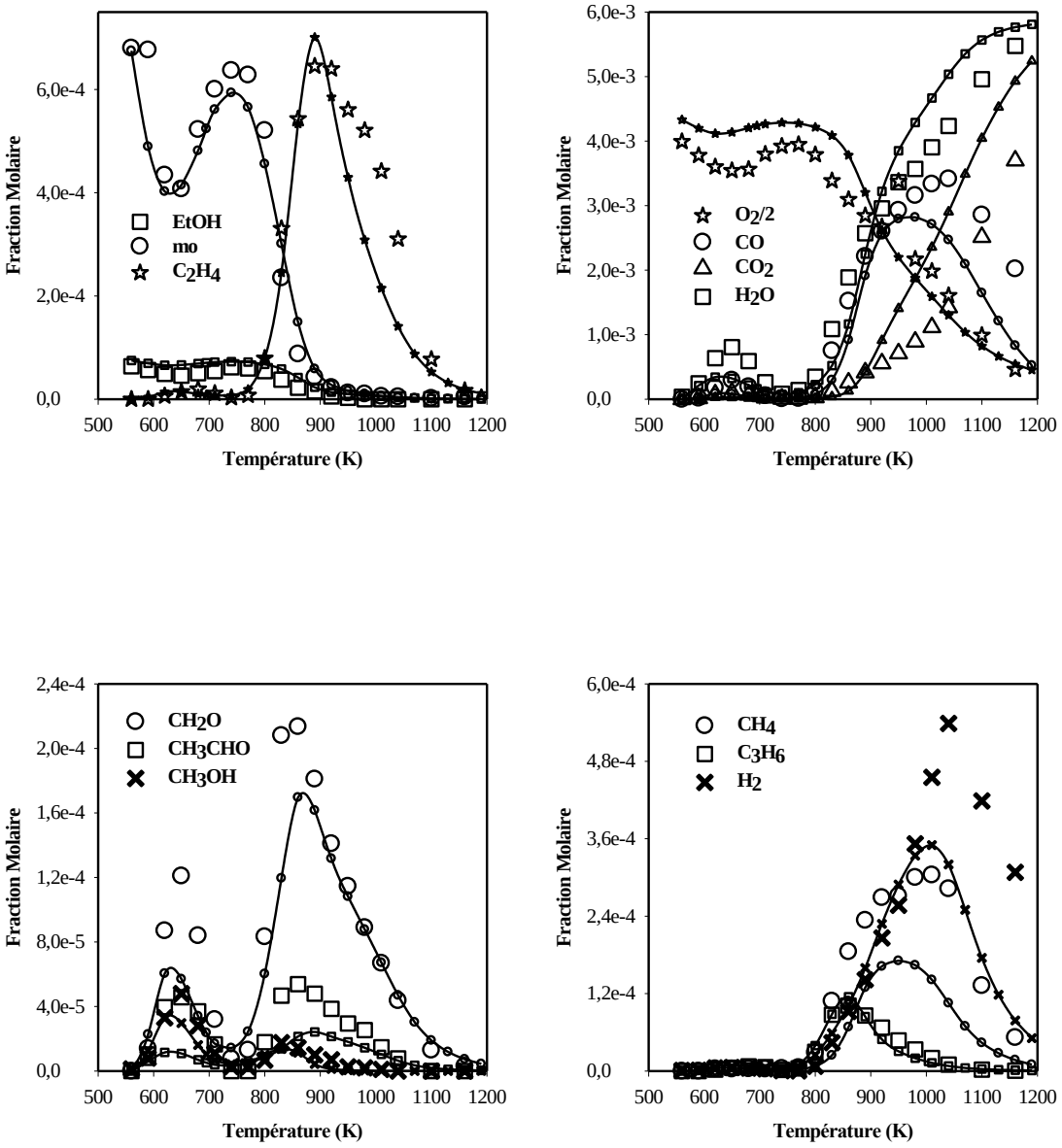


Figure A2-5 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

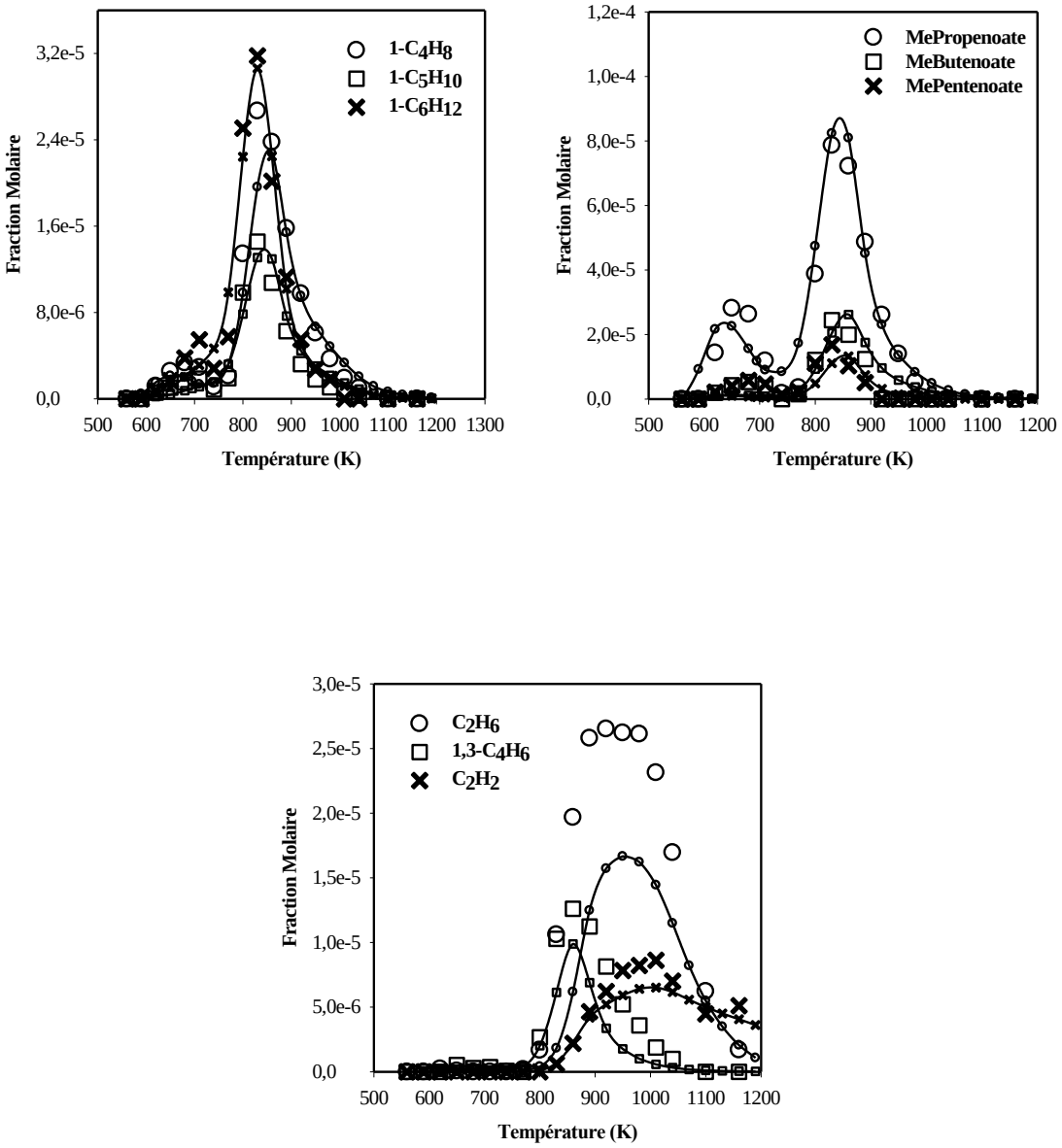


Figure A2-5 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

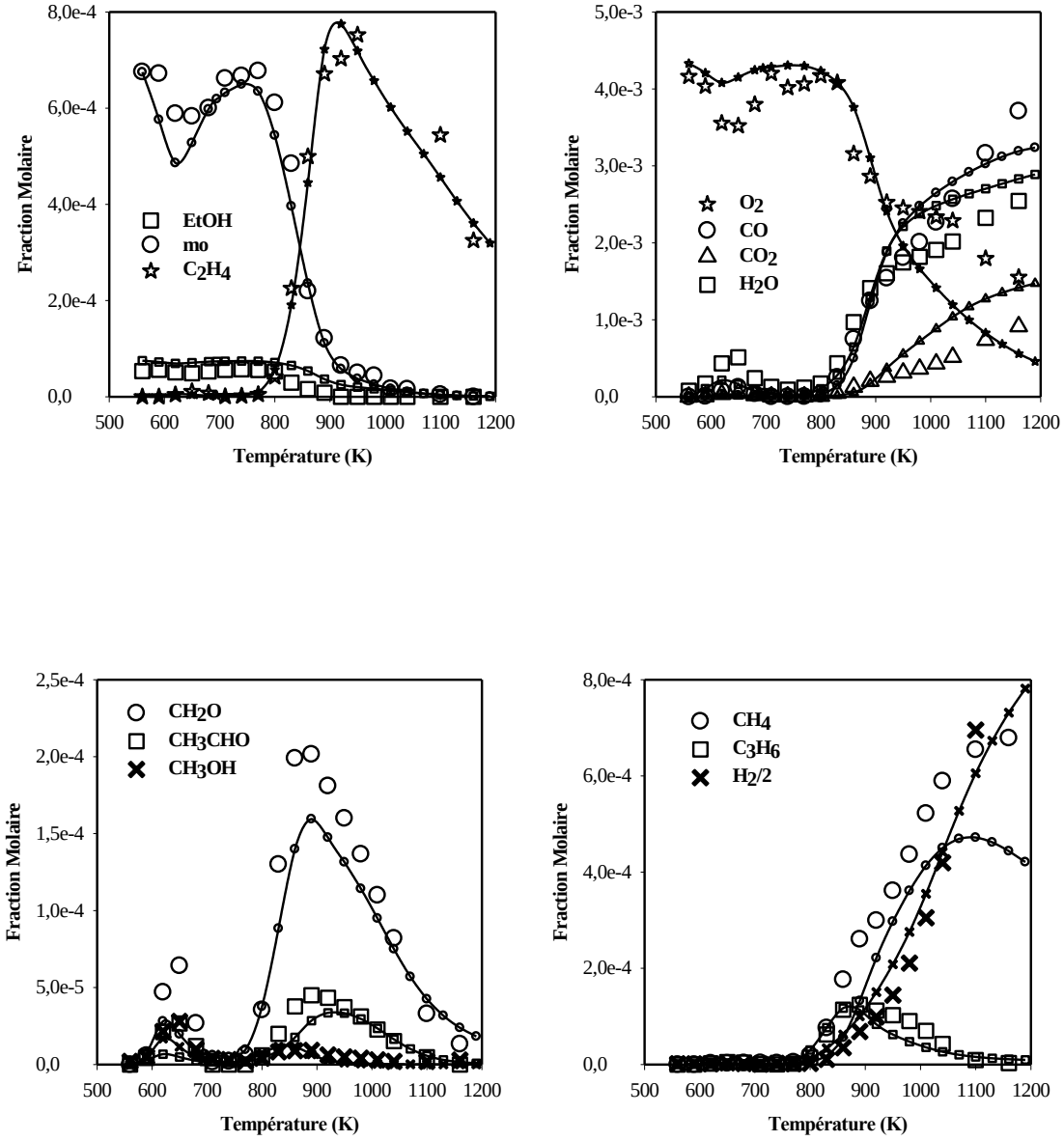


Figure A2-6 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=2 ; τ=0,7 s

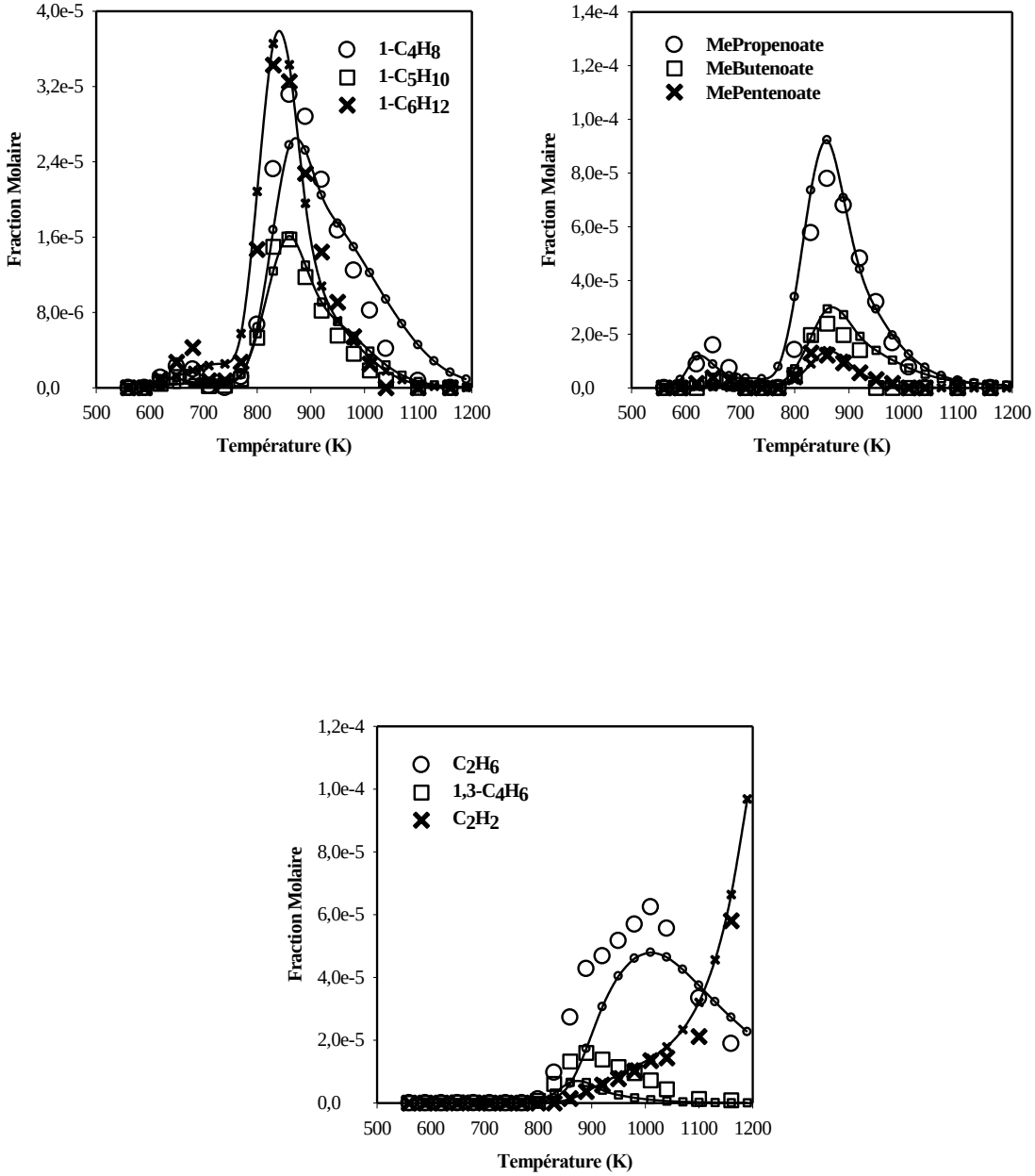


Figure A2-6 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/éthanol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=2 ; τ=0,7 s

- Confrontation modèle-expérience en réacteur auto-agité : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol

Le tableau A2-2 présente les conditions d'étude du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol.

octanoate de méthyle/butan-1-ol (%mole)	Pression (atm)	Temps de passage (s)	$X_{Mélange}$ initiale	X_{O2} initiale	X_{N2} initiale	Richesse	Température (K)
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$13{,}88.10^{-3}$	$9{,}8538.10^{-1}$	0,5	560-1160
50/50	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$6{,}94.10^{-3}$	$9{,}9231.10^{-1}$	1,0	560-1160
80/20	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$16{,}80.10^{-3}$	$9{,}8245.10^{-1}$	0,5	560-1160
80/20	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$8{,}40.10^{-3}$	$9{,}9085.10^{-1}$	1,0	560-1160
90/10	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$17{,}78.10^{-3}$	$9{,}8148.10^{-1}$	0,5	560-1160
90/10	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$8{,}89.10^{-3}$	$9{,}9036.10^{-1}$	1,0	560-1160
90/10	10	0,7	$7{,}50.10^{-4}$	$4{,}44.10^{-3}$	$9{,}9481.10^{-1}$	2,0	560-1160

Tableau A2-2 : Oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol en réacteur auto-agité : conditions expérimentales

Les comparaisons entre les profils expérimentaux et simulés des réactifs et produits d'oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol sont présentées sur les figures A2-7 à A2-13. D'une manière globale, l'accord observé entre les prévisions du modèle et les résultats expérimentaux est satisfaisant. Cependant des améliorations sont encore nécessaires.

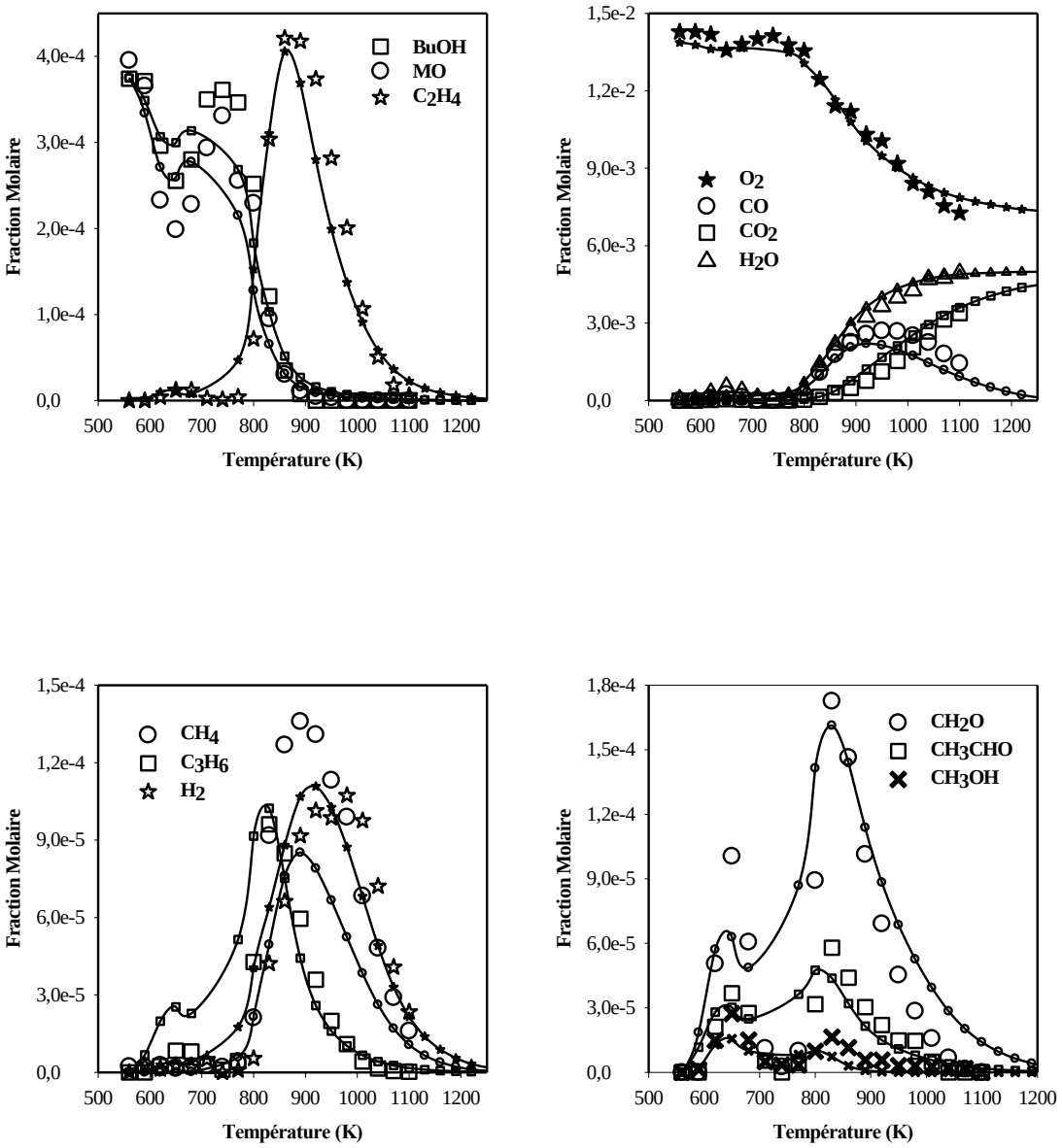


Figure A2-7 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/1-butanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

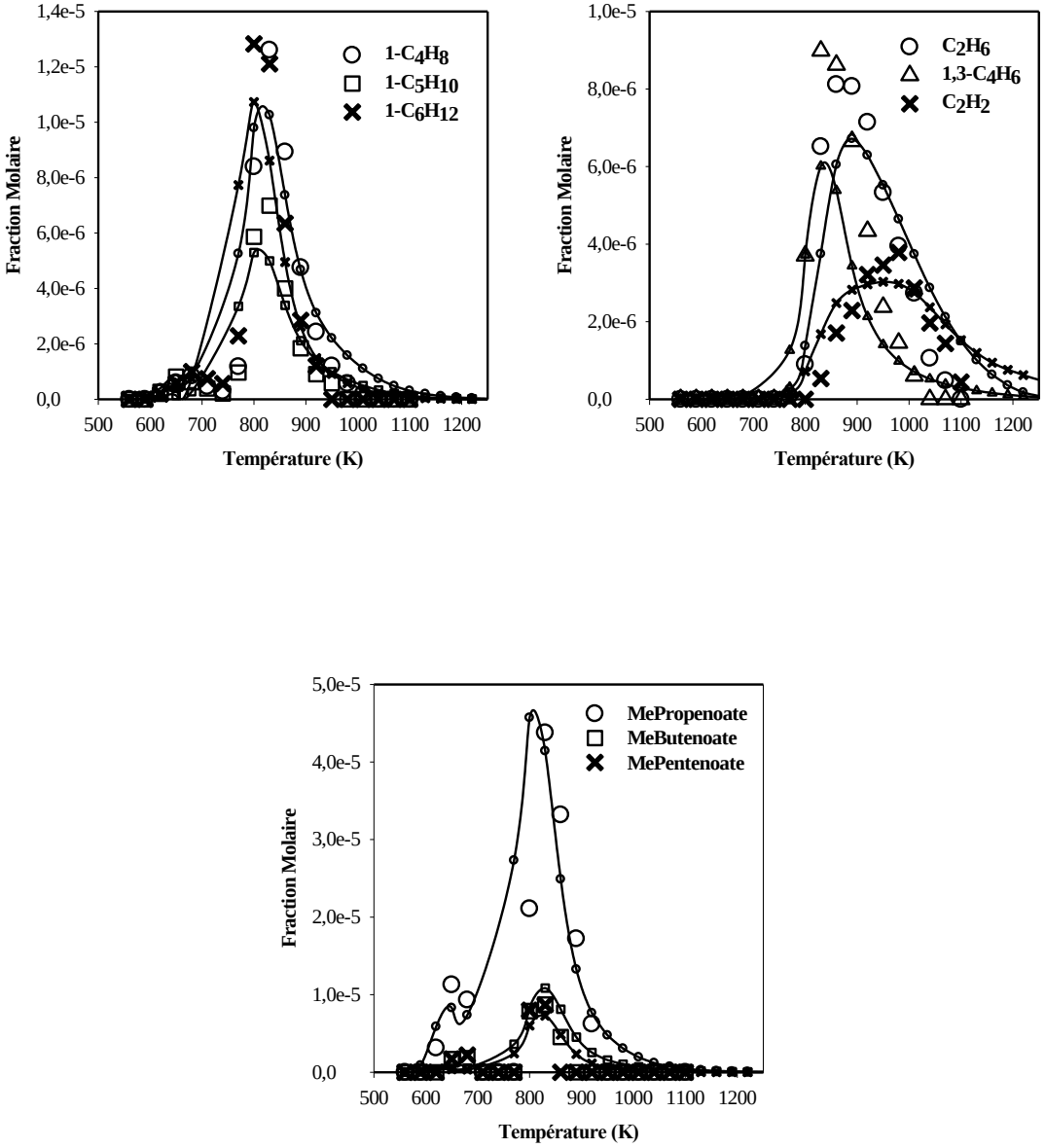


Figure A2-7 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/1-butanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

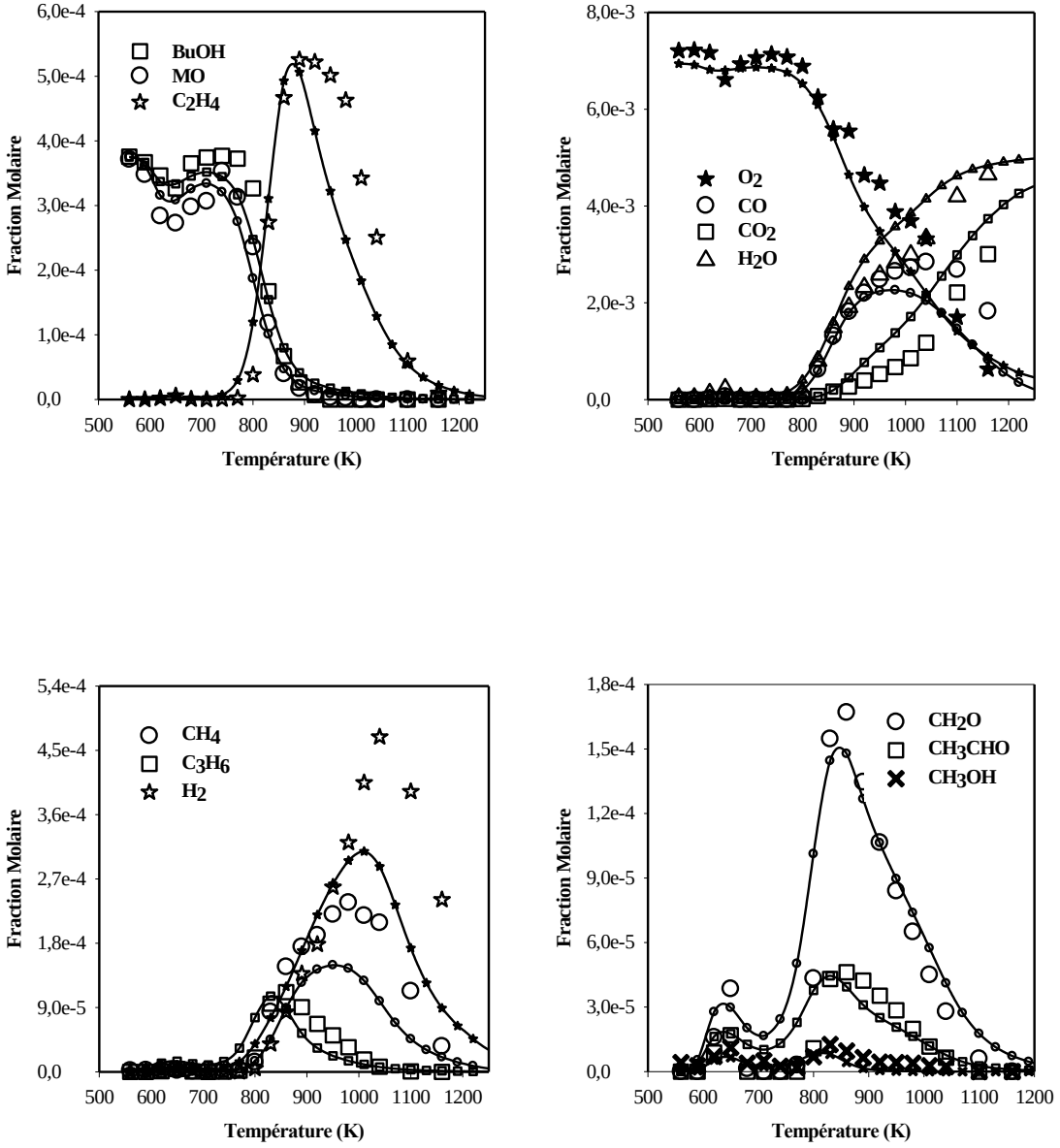


Figure A2-8 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/1-butanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

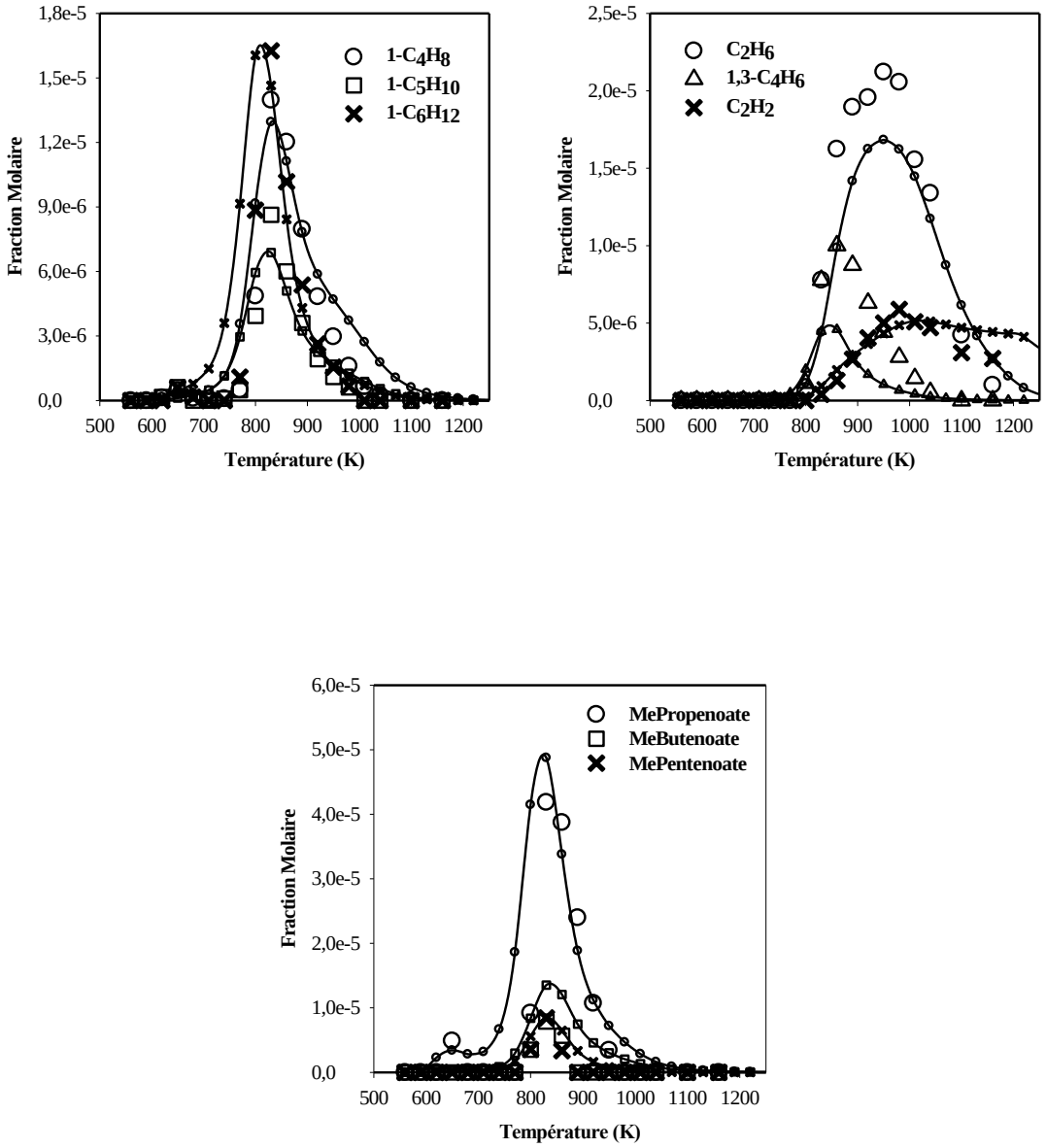


Figure A2-8 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/1-butanol 50/50 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

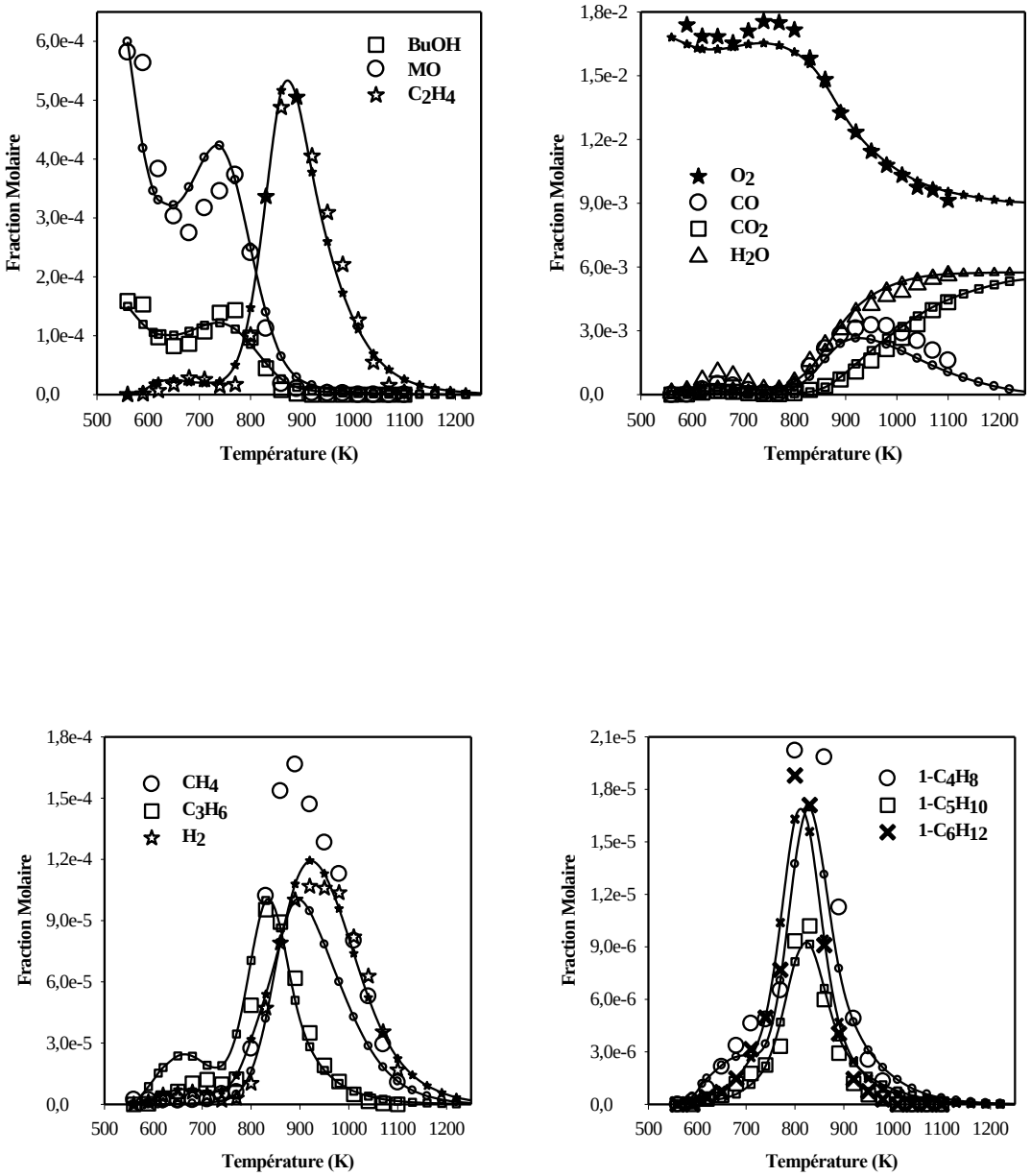


Figure A2-9 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

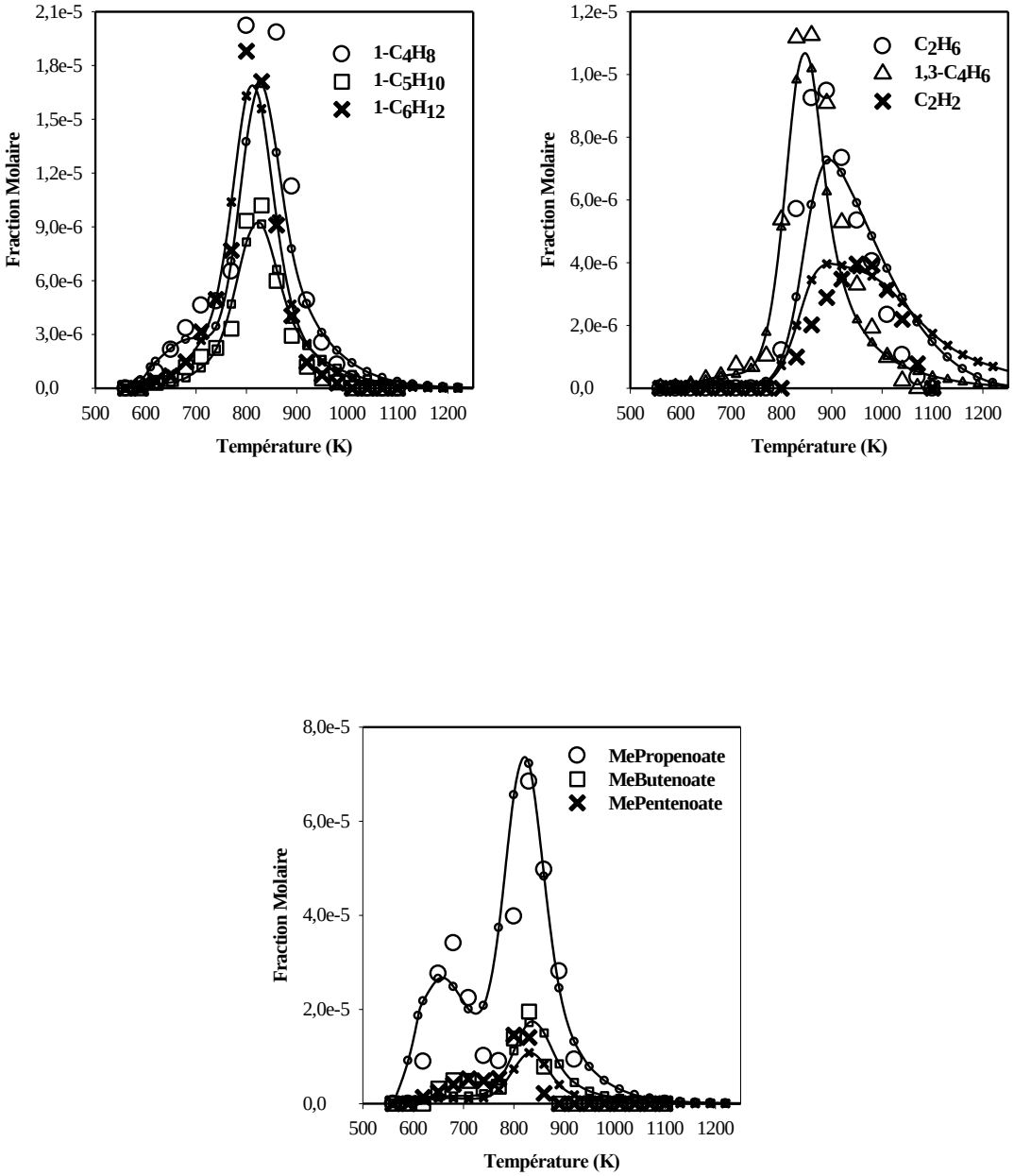


Figure A2-9 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 80/20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

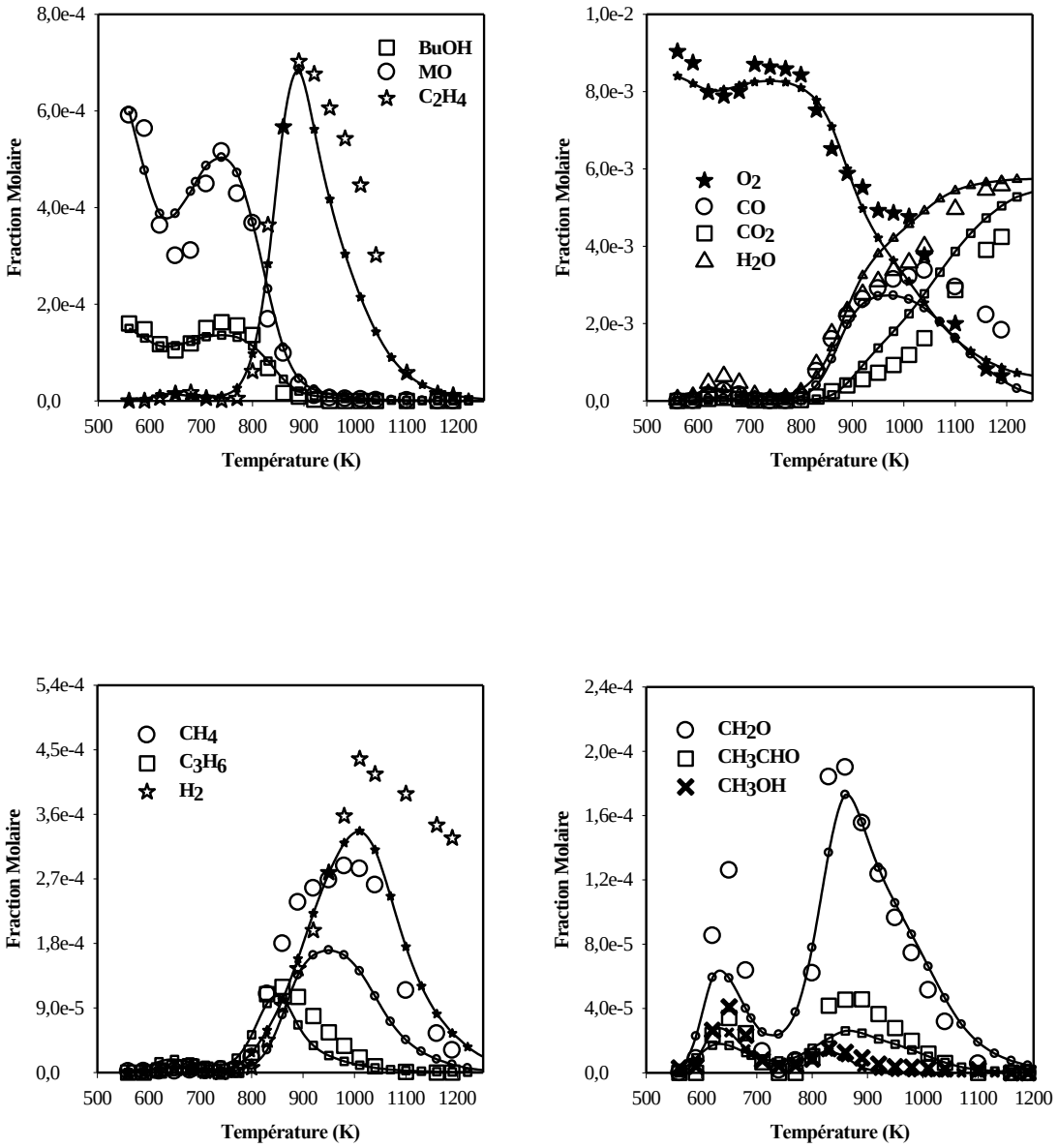


Figure A2-10 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 80-20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

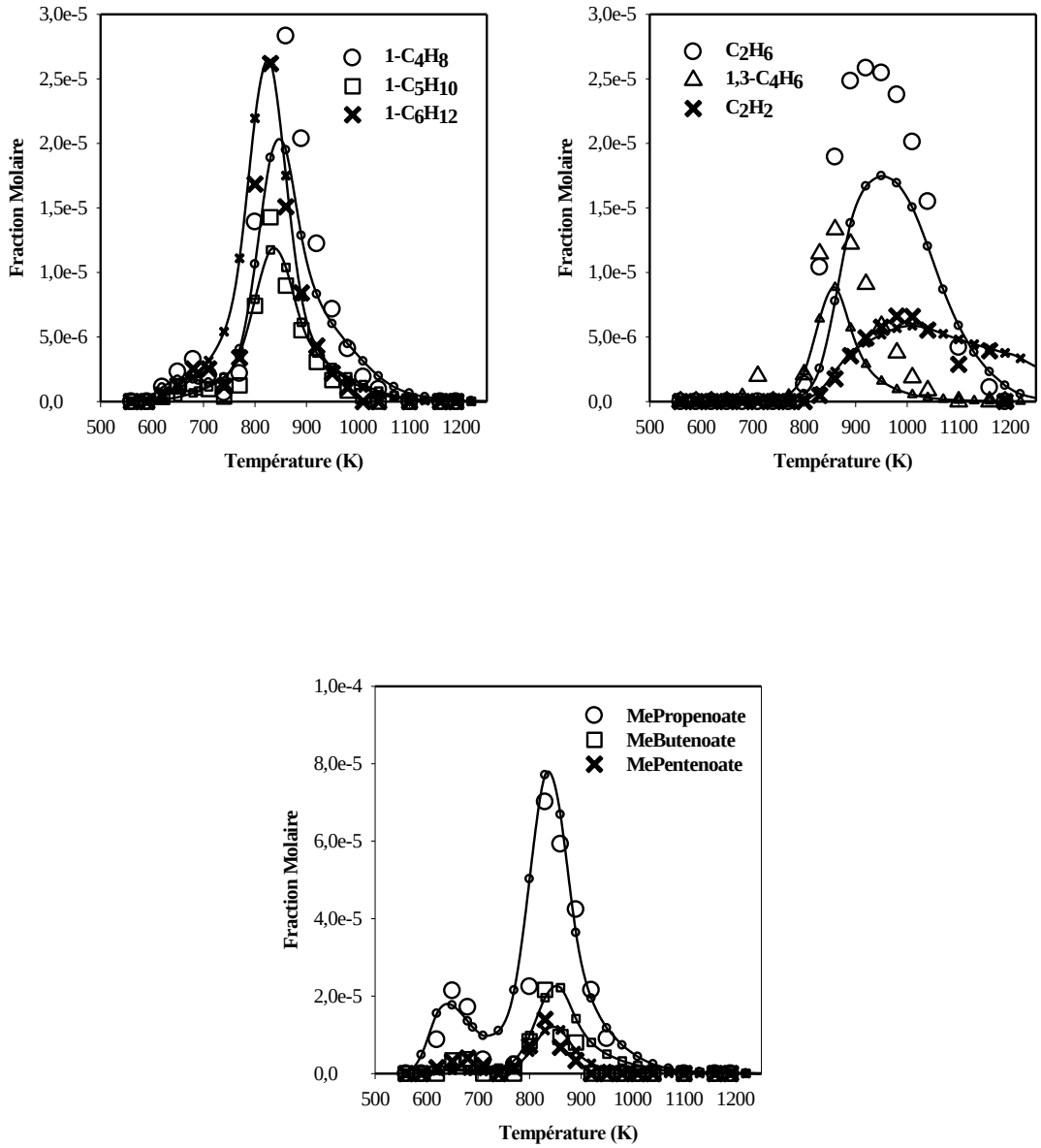


Figure A2-10 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 80-20 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

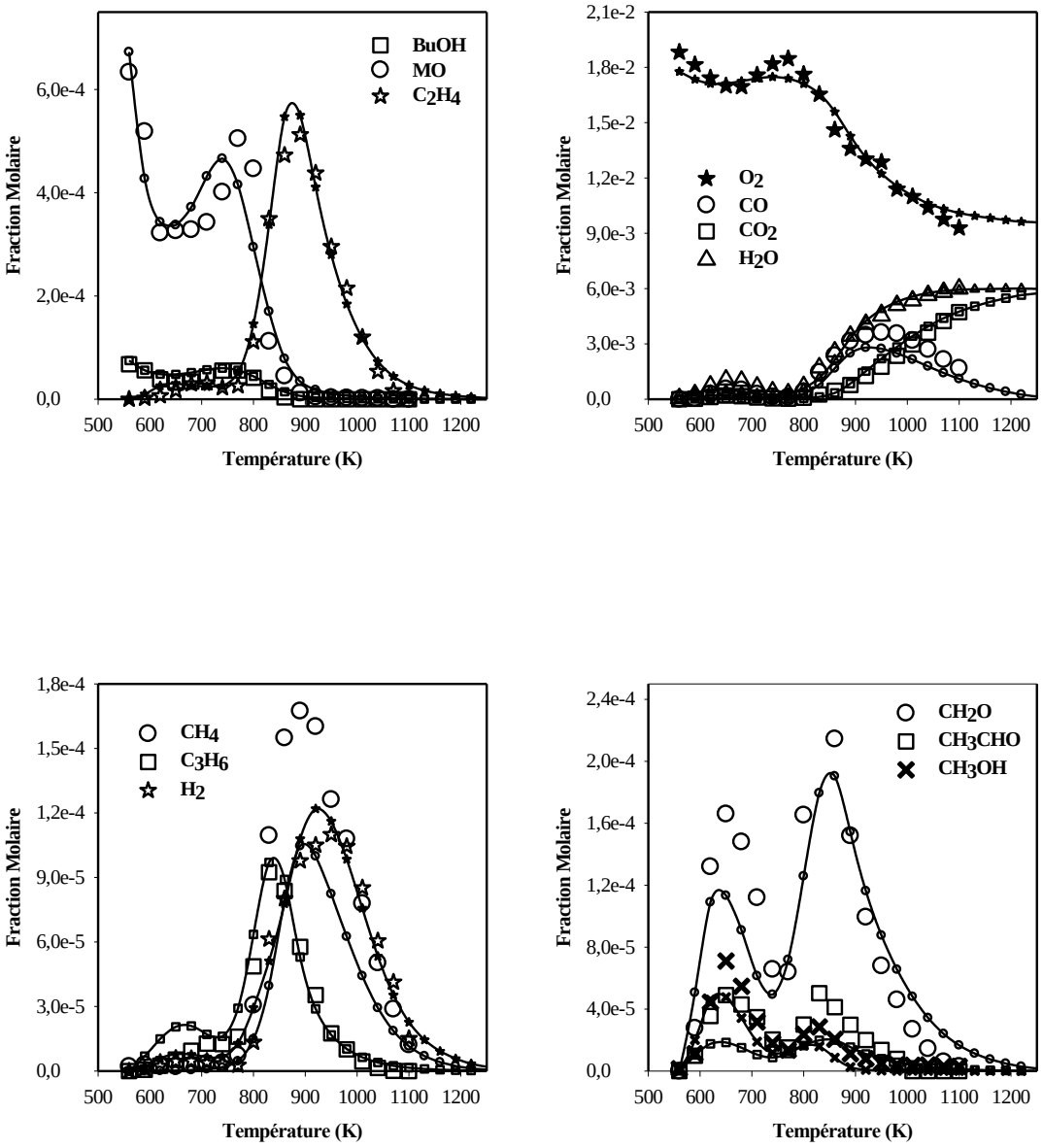


Figure A2-11 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

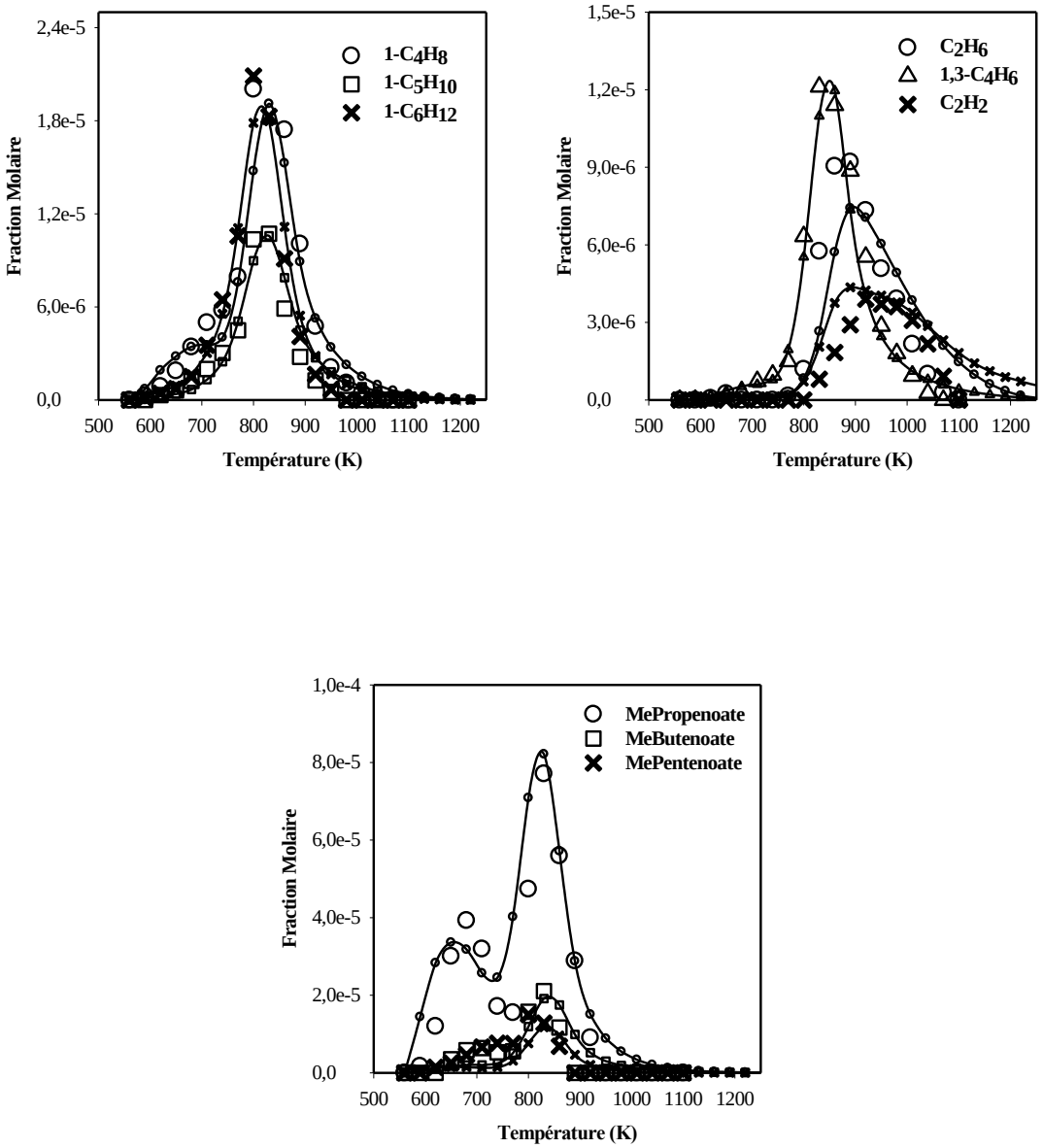


Figure A2-11 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=0,5, τ=0,7 s

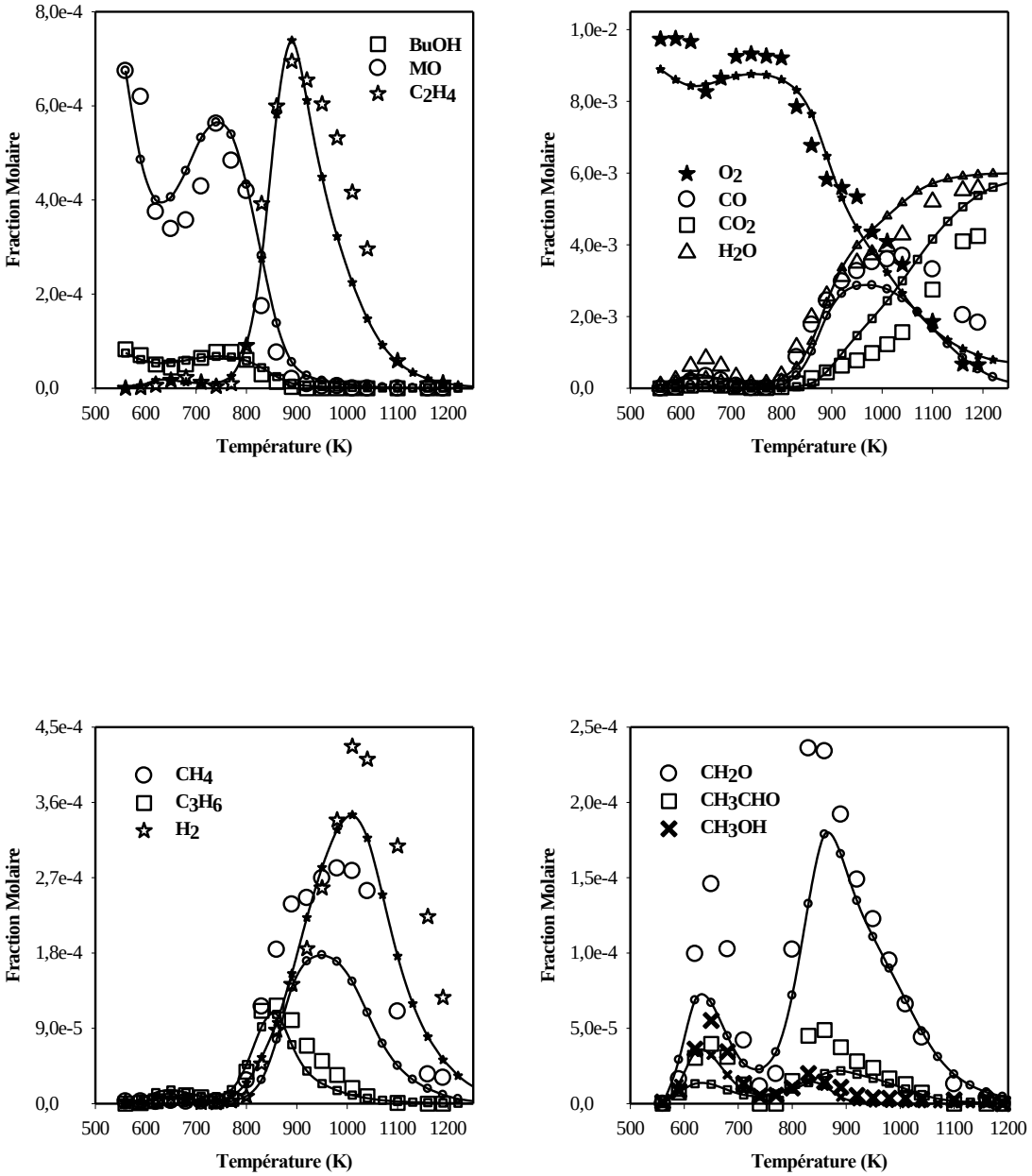


Figure A2-12 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

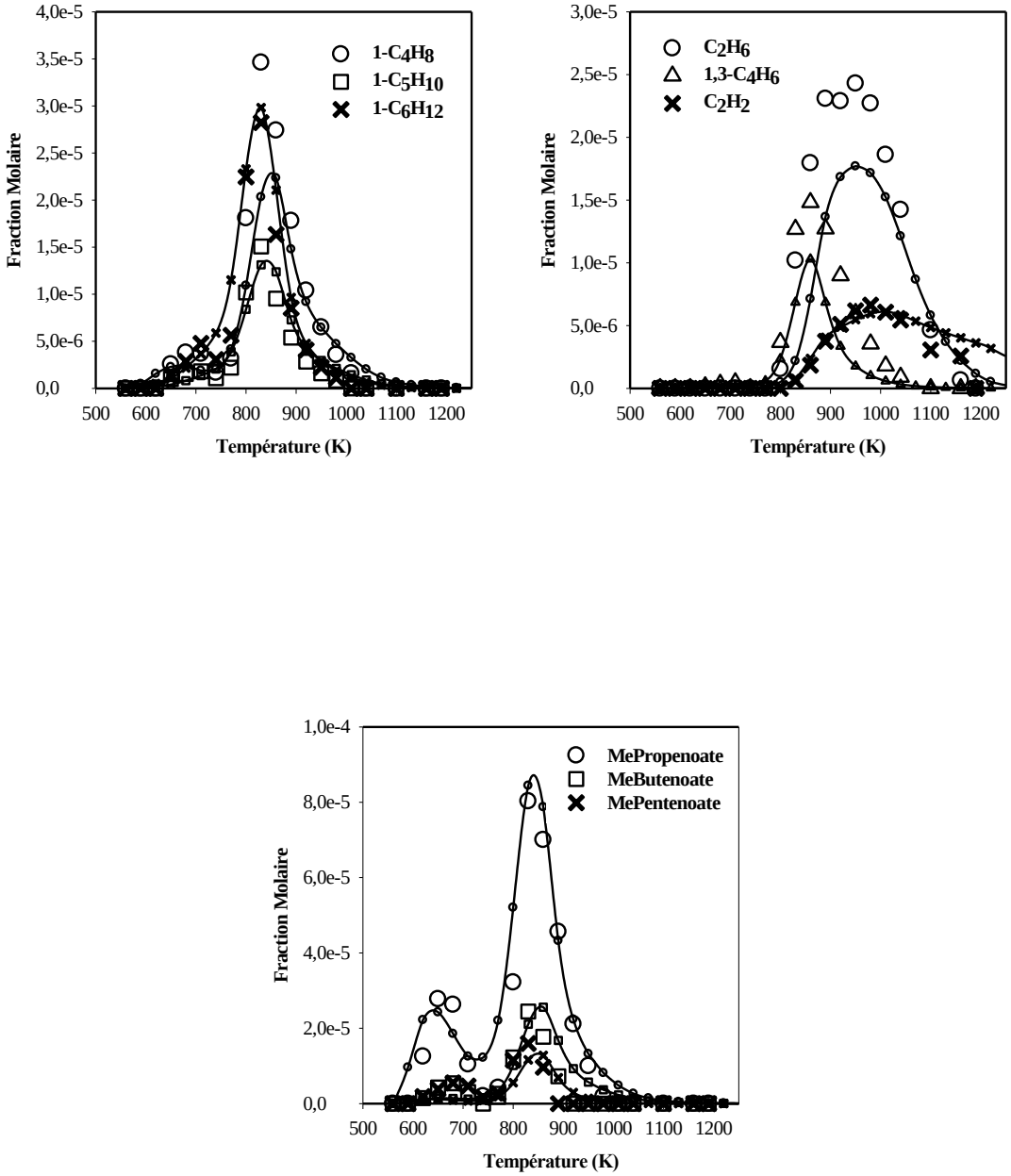


Figure A2-12 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=1 ; τ=0,7 s

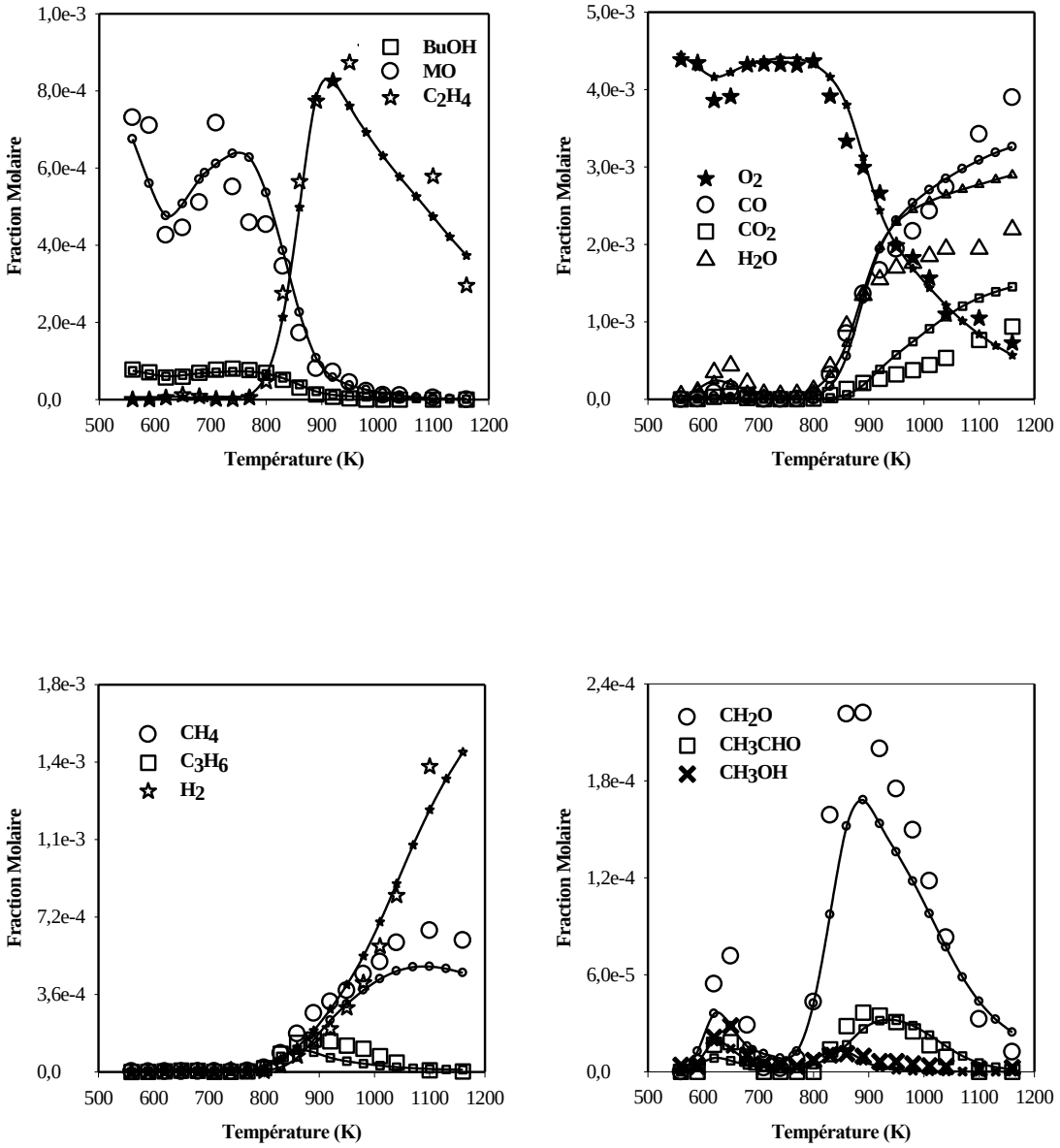


Figure A2-13 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=2 ; τ=0,7 s

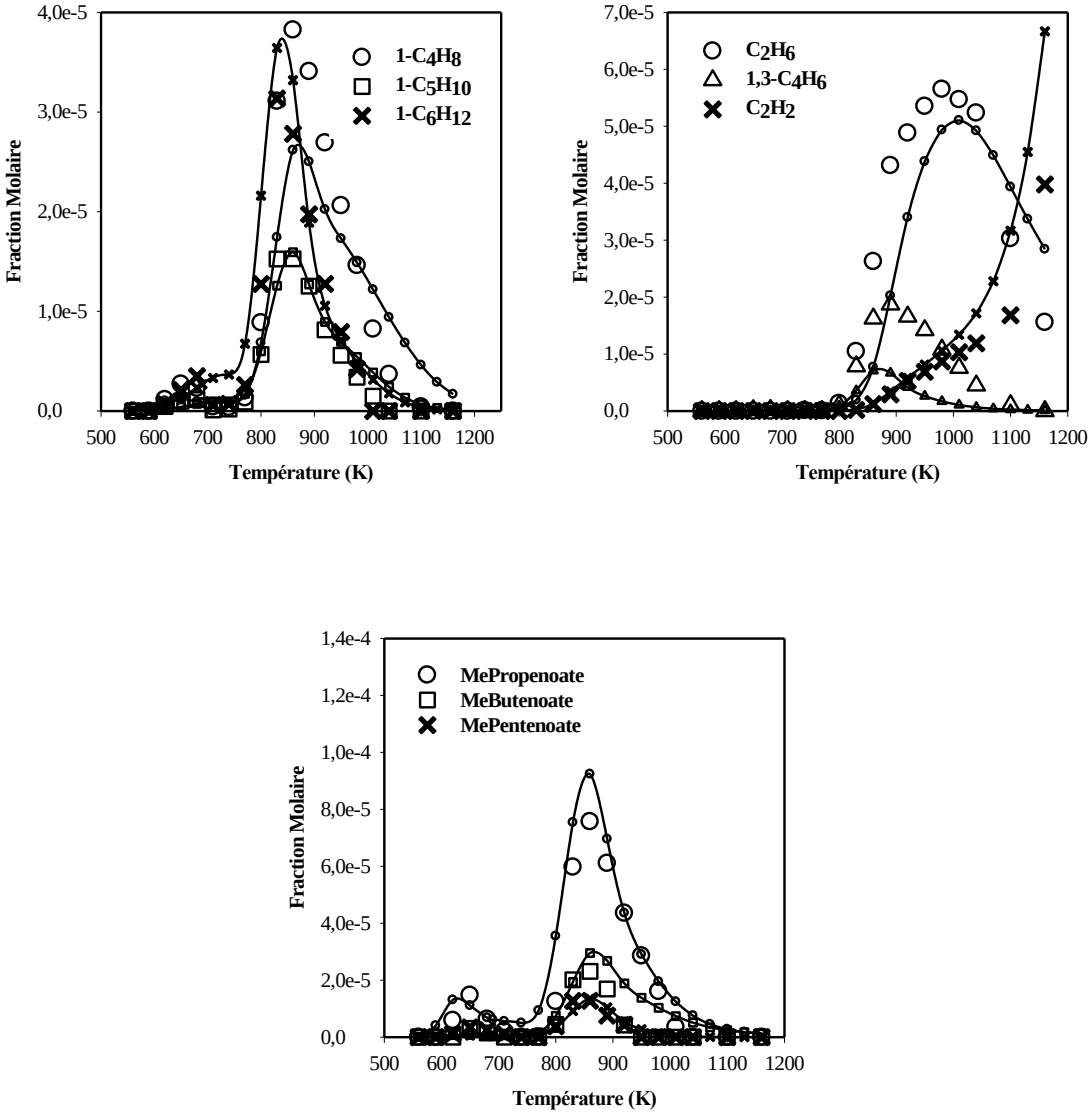


Figure A2-13 : Confrontation modèle (lignes et petits symboles)-expérience (grands symboles) : oxydation du mélange octanoate de méthyle/butan-1-ol 90/10 (mole/mole) en réacteur auto-agité à 10 atm : 750 ppm du mélange, φ=2 ; τ=0,7 s

Annexe A3 : Publications et communications issues de ce travail de thèse

Annexe A3-1 Publications

[1] P. Dagaut and C. Togbé

Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol-gasoline surrogate mixtures (E85 surrogate) in jet stirred reactor. Energy and Fuels. 2008, 22, p. 3499-3505

[2] P. Dagaut and C. Togbé

Oxidation kinetics of butanol-gasoline surrogate mixtures in a jet-stirred : Experimental and modeling study. Fuel 2008, 87, p. 3313-3321

[3] P. Dagaut and C. Togbé

Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of butanol-n-heptane mixtures in a jet-stirred reactor. Energy and Fuels, 2009, 23, p. 3527-3535

[4] 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, 23, p. 4254-4268

[5] W. K. Metcalfe, C. Togbé, P. Dagaut, H. J. Curran, and J. M. Simmie

A jet-stirred reactor and kinetic modeling study of ethyl proponoate oxidation. Combustion and Flame. 2009, 156, p. 250-260

[6] S. M. Sarathy, M. J. Thomson, C. Togbé, P. Dagaut, F. Halter and C. Mounaïm-Rousselle

An experimental and kinetic modeling study of n-butanol combustion. Combustion and Flame, 2009, 156, p. 852-864

[7] C. Togbé, A. M. Ahmed and P. Dagaut

Experimrntal and modeling study of the kinetics of oxidation of methanol-gasoline surrogate mixtures (M85 surrogate) in a jet-stirred reactor. Energy and Fuels, 2009, 23, 1936-1941

[8] C. Togbé, J.-B. May Carle, G Dayma and P. Dagaut

Chemical kinetic study of the oxidation of a biodiesel-bioethanol surrogate fuel: methyl octanoate-ethanol mixtures. The Journal of Physical Chemistry A. 2010, 114 (11), p. 3896-3908

[9] P. Dagaut and C. Togbé

Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of ethanol-n-heptane mixtures in a jet-stirred reactor. Fuels 2010, 89, 280-286

[10] C. Togbé, G. Dayma, A. Mzé-Ahmed and P. Dagaut

Experimental and modeling study of the kinetics of oxidation of simple biodiesel-biobutanol surrogates: methyl octanoate-butanol mixtures.Energy and Fuels, 2010, 24 (7), p. 3906-3916

Annexe A3-2 Conférences

[1] C. Togbé, J.-B. May Carle, G. Dayma et P. Dagaut

Oxydation en réacteur auto-agité d'un mélange modèle de carburant biodiesel-bioéthanol : octanoate de méthyle-éthanol

Présentation orale à la journée des doctorants du GFC (Paris 6 – Jussieu)-15 Janvier 2010

[2] C. Togbé, F. Halter, C. Mounaïm-Rousselle and P. Dagaut

Experimental and detailed kinetic modeling study of 1-pentanol oxidation in JSR and combustion in a bomb

Présentation orale au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine)- 01 au 06 Août 2010

[3] G. Dayma, S. M. Sarathy, C. Togbé, C. Yeung, M. J. Thomson and P. Dagaut

Experimental and kinetic modeling of methyl octanoate oxidation in an opposed-flow diffusion flame and jet-stirred reactor

Présentation orale au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine)- 01 au 06 Août 2010

[4] B. Rotavera, P. Diévart, C. Togbé, P. Dagaut and E. L. Peterson

Oxidation kinetics of n-nonane: measurements and modeling of ignition delay times and products concentrations

Présentation orale au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine)- 01 au 06 Août 2010

[5] P. H. Ramirez, K Hadj Ali, P. Diévart, G. Dayma, C. Togbé and P. Dagaut

Oxidation of commercial and surrogate bio-diesel fuels (B30) in a jet-stirred reactor at elevated pressure: experimental and modeling kinetic study

Présentation orale au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine)- 01 au 06 Août 2010

[6] S. Saisirirat, C. Togbé, S. Chanchaona, F. Foucher, C. Mounaïm-Rousselle and P. Dagaut

Auto-ignition and combustion characteristics in HCCI and JSR using 1-butanol/n-heptane and ethanol/n-heptane blends

Présentation orale au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine)- 01 au 06 Août 2010

Annexe A3-3 Poster

[1] W. K. Metcalfe, C. Togbé, J. M. Simmie, P. Dagaut and H. J. Curran

A shock tube and jet-stirred reactor study of 2,5-dimethylfuran oxidation

Poster présenté au 33ème Symposium International de Combustion (Pékin – Chine) - 01 au 06 Août 2010

Annexe A4 : Mécanisme cinétique et données thermodynamiques des espèces présentes dans le mécanisme

Annexe: Mecanisme reactionnel et donnees thermodynamiques.

	REACTIONS	A	b	E
1.	ch3ocho(+m)=ch2ocho+h(+m)	2.69E+16	-0.1	98940
	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	
2.	ch3oco+h=ch3ocho	1.00E+14	0.0	0
3.	ch3ocho=ocho+ch3	3.21E+17	-0.5	79970
4.	hco+ch3o+m=ch3ocho+m	1.50E+13	0.0	0
5.	ch3ocho+o2=ch2ocho+ho2	3.00E+13	0.0	52000
6.	ch3ocho+o2=ch3oco+ho2	2.00E+13	0.0	49700
7.	ch3ocho(+m)=ch3oh+co(+m)	7.49E+14	0.0	68710
	Low pressure limit: 0.40500E+16 0.00000E+00	0.52980E+05		
8.	ch3ocho(+m)=ch4+co2(+m)	4.46E+13	0.0	68240
	Low pressure limit: 0.16900E+16 0.00000E+00	0.51110E+05		
9.	ch3ocho+o=ch2ocho+oh	9.80E+05	2.4	4750
10.	ch3ocho+o=ch3oco+oh	5.51E+05	2.5	2830
11.	ch3ocho+h=ch2ocho+h2	1.42E+07	2.0	8880
12.	ch3ocho+h=ch3oco+h2	2.72E+07	1.9	7880
13.	ch3ocho+oh=ch2ocho+h2o	2.13E+06	2.0	1460
14.	ch3ocho+oh=ch3oco+h2o	1.61E+06	1.9	30
15.	ch3ocho+ho2=ch2ocho+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
16.	ch3ocho+ho2=ch3oco+h2o2	9.64E+03	2.6	13910
17.	ch3ocho+ch3=ch2ocho+ch4	1.39E+01	3.4	11520
18.	ch3ocho+ch3=ch3oco+ch4	6.56E+01	3.3	10010
19.	ch3ocho+ch3o=ch2ocho+ch3oh	3.01E+11	0.0	4070
20.	ch3ocho+ch3o=ch3oco+ch3oh	1.62E+12	0.0	8190
21.	ch3ocho+hco=ch2ocho+ch2o	1.02E+05	2.5	18430
22.	ch3ocho+hco=ch3oco+ch2o	5.40E+06	1.9	17010
23.	ch3ocho+ch3o2=ch2ocho+ch3o2h	2.38E+04	2.5	16490
24.	ch3ocho+ch3o2=ch3oco+ch3o2h	4.82E+03	2.6	13910
25.	ch2ocho=ch3oco	2.62E+11	0.0	38180
26.	ch3oco=ch3+co2	4.84E+10	1.1	15887
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.57E+04	2.5	37247
27.	ch3oco=ch3o+co	8.02E+11	0.7	21123
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.35E+04	2.3	7883
28.	ch2ocho=ch2o+hco	1.64E+22	-2.3	31950
29.	ocho+co=chooco	1.50E+11	0.0	3000
30.	hco+co2=chooco	1.50E+11	0.0	36730
31.	me2j+h=me	1.00E+14	0.0	0
32.	me=memj+h	7.90E+15	0.0	97970
33.	me=ch3oco+ch3	1.13E+16	0.0	77700
34.	ch3co+ch3o=me	1.50E+13	0.0	0
35.	me=eaoj+ch3	4.50E+16	0.0	88600
36.	me=ch2co+ch3oh	3.80E+10	0.0	55030
37.	me+o2=memj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
38.	me+o2=me2j+ho2	2.00E+12	0.0	50500
39.	eaoj=>co2+ch3	5.00E+14	0.0	0
40.	me+h=me2j+h2	2.85E+07	2.0	7700
41.	me+h=memj+h2	1.44E+13	0.0	6095
42.	me+o=me2j+oh	5.10E+13	0.0	7850
43.	me+o=memj+oh	9.65E+04	2.7	3716
44.	me+oh=me2j+h2o	2.67E+06	2.0	450
45.	me+oh=memj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
46.	me+ho2=me2j+h2o2	6.00E+11	0.0	17000
47.	me+ho2=memj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
48.	me+ch3=me2j+ch4	3.00E-01	4.0	8200
49.	me+ch3=memj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
50.	me+ch3o=me2j+ch3oh	1.62E+11	0.0	7300
51.	me+ch3o=memj+ch3oh	3.01E+11	0.0	4070
52.	me+hco=me2j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
53.	me+hco=memj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
54.	me+ch2oh=me2j+ch3oh	9.90E+01	3.0	14000
55.	me+ch2oh=memj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
56.	me+c2h3=me2j+c2h4	1.20E+02	3.3	19840
57.	me+c2h3=memj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
58.	me+c2h5=me2j+c2h6	3.00E+11	0.0	13500
59.	me+c2h5=memj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
60.	me+me2j=memj+me	1.20E+02	3.3	19840
61.	ch2co+ch3o=me2j	5.00E+11	0.0	-1000
62.	memj=ch2o+ch3co	1.64E+22	-2.3	31950
63.	me2j=memj	1.50E+08	1.0	24800
64.	mp=mp3j+h	7.90E+15	0.0	97970
65.	mp2j+h=mp	1.00E+14	0.0	0
66.	mp=mpmj+h	7.90E+15	0.0	97970
67.	mp=me2j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
68.	mp=ch3oco+c2h5	1.13E+16	0.0	81700
69.	c2h5co+ch3o=mp	1.50E+13	0.0	0
70.	mp=paoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
71.	mp+o2=mp3j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
72.	mp+o2=mp2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
73.	mp+o2=mpmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
74.	co2+c2h5=paoj	1.00E+11	0.0	39360
75.	mp+h=mp3j+h2	9.40E+04	2.8	6280
76.	mp+h=mp2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
77.	mp+h=mpmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
78.	mp+o=mp3j+oh	9.65E+04	2.7	3716
79.	mp+o=mp2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
80.	mp+o=mpmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
81.	mp+oh=mp3j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
82.	mp+oh=mp2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
83.	mp+oh=mpmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
84.	mp+ho2=mp3j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
85.	mp+ho2=mp2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
86.	mp+ho2=mpmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
87.	mp+hco=mp3j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
88.	mp+hco=mp2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
89.	mp+hco=mpmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
90.	mp+ch3=mp3j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
91.	mp+ch3=mp2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
92.	mp+ch3=mpmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
93.	mp+ch3o=mp3j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
94.	mp+ch3o=mp2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
95.	mp+ch3o=mpmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
96.	mp+ch2oh=mp3j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
97.	mp+ch2oh=mp2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
98.	mp+ch2oh=mpmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
99.	mp+ch3o2=mp3j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
100.	mp+ch3o2=mp2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
101.	mp+ch3o2=mpmj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
102.	mp+c2h3=mp3j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
103.	mp+c2h3=mp2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
104.	mp+c2h3=mpmj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
105.	mp+c2h5=mp3j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
106.	mp+c2h5=mp2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
107.	mp+c2h5=mpmj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
108.	mp+c3h5-a=mp3j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
109.	mp+c3h5-a=mp2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
110.	mp+c3h5-a=mpmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
111.	mp+mp2j=mp3j+mp	1.20E+02	3.3	19840
112.	mp+mp2j=mpmj+mp	1.20E+02	3.3	19840
113.	mp3j=c2h4+ch3oco	2.00E+13	0.0	28700
114.	ch3chco+ch3o=mp2j	5.58E+01	2.8	5973
115.	mpmj=ch2o+c2h5co	1.64E+22	-2.3	31950
116.	mp3j=mp2d+h	3.00E+13	0.0	38000
117.	mp2j=h+mp2d	7.94E+13	0.0	49900
118.	mp3j=mpmj	2.50E+07	1.0	14500
119.	mp2j=mpmj	1.50E+08	1.0	24800
120.	mp3j+o2=mp2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
121.	mp2j+o2=mp2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
122.	mp2d=mp2dmj+h	7.90E+15	0.0	97970
123.	mp2d=mp2d3j+h	7.59E+14	0.0	101000
124.	mp2d=c2h3co+ch3o	2.98E+22	-1.9	90170
125.	mp2d=c2h3co2+ch3	3.16E+16	0.0	83070
126.	c2h3+ch3oco=mp2d	1.00E+13	0.0	0
127.	mp2d+o2=mp2d3j+ho2	2.00E+13	0.0	57600
128.	mp2d+o2=mp2d2j+ho2	2.00E+13	0.0	45000
129.	mp2d+o2=mp2dmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
130.	mp2d+h=mp2dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
131.	mp2d+o=mp2dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
132.	mp2d+oh=mp2dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
133.	mp2d+ho2=mp2dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
134.	mp2d+ch3=mp2dmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
135.	mp2d+ch3o=mp2dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
136.	mp2d+ch3o2=mp2dmj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
137.	mp2d+c2h3=mp2dmj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
138.	mp2d+c2h5=mp2dmj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
139.	mp2d+h<=>mp2d3j+h2	8.20E+05	2.5	12280
140.	mp2d+oh<=>mp2d3j+h2o	2.20E+06	2.0	2780
141.	mp2d+ch3<=>mp2d3j+ch4	1.36E+00	3.5	12900
142.	mp2d+o<=>mp2d3j+oh	1.20E+11	0.7	8960
143.	mp2d+h<=>mp2d2j+h2	4.10E+05	2.5	9790
144.	mp2d+oh<=>mp2d2j+h2o	1.10E+06	2.0	1450
145.	mp2d+ch3<=>mp2d2j+ch4	9.80E-01	3.5	11700
146.	mp2d+o<=>mp2d2j+oh	6.00E+10	0.7	7630
147.	mp2d3j=c2h2+ch3oco	7.68E+19	-1.5	47410
148.	mp2d2j=>ch2cco+ch3o	6.30E+24	-2.9	56150
149.	mp2dmj=c2h3co+ch2o	2.00E+13	0.0	29000
150.	mp2oh3j=ch3oco+c2h4o1,2	2.00E+13	0.0	23000
151.	mp2d+o=me2j+hco	1.58E+07	1.8	-1216
152.	mp2d+o=ch3oco+ch3co	5.01E+07	1.8	76
153.	mp2d+oh=mp2oh3j	1.37E+12	0.0	-1040
154.	mp2d+oh=ch3cho+ch3oco	1.37E+12	0.0	-1040
155.	ch2cco+h=c2h3co	8.00E+11	0.0	2000
156.	ch2cco+oh=ch2o+hcco	1.37E+12	0.0	-1040
157.	ch2cco+oh=ch3+co+co	1.37E+12	0.0	-1040
158.	ch2cco+oh=ch2co+hco	1.37E+12	0.0	-1040
159.	ch2cco+oh=c2h3+co2	1.37E+12	0.0	-1040
160.	c2h3co2=>c2h3+co2	2.20E+11	0.3	4580
161.	mb=mb4j+h	7.90E+15	0.0	97970
162.	mb=mb3j+h	5.00E+15	0.0	94990
163.	mb2j+h=mb	1.00E+14	0.0	0
164.	mb=mbmj+h	7.90E+15	0.0	97970
165.	mb=mp3j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
166.	mb=me2j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
167.	mb=ch3oco+nc3h7	1.13E+16	0.0	81700
168.	nc3h7co+ch3o=mb	1.50E+13	0.0	0
169.	mb=baoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
170.	mb=>c3h6co+ch3oh	3.80E+11	0.0	57500
171.	c3h6co=c2h5+hcco	1.50E+11	0.0	3000
172.	c3h6co+h=>nc3h7+co	4.40E+12	0.0	1459
173.	c3h6co+oh=>nc3h7+co2	3.73E+12	0.0	-1010
174.	c3h6co+o=>c3h6+co2	3.20E+12	0.0	-437
175.	mb+o2=ho2+mb4j	2.00E+13	0.0	50870
176.	mb+o2=ho2+mb3j	4.00E+13	0.0	47690
177.	mb+o2=ho2+mb2j	4.00E+13	0.0	45200
178.	mb+o2=ho2+mbmj	2.05E+13	0.0	44910
179.	co2+nc3h7=baoj	1.00E+11	0.0	39360
180.	mb+h=h2+mb4j	9.40E+04	2.8	6280
181.	mb+h=h2+mb3j	1.30E+06	2.4	4471
182.	mb+h=h2+mb2j	1.00E+14	0.0	7300
183.	mb+h=h2+mbmj	9.40E+04	2.8	6280
184.	mb+o=oh+mb4j	9.65E+04	2.7	3716
185.	mb+o=oh+mb3j	4.77E+04	2.7	2106
186.	mb+o=oh+mb2j	8.80E+10	0.7	3250
187.	mb+o=oh+mbmj	1.44E+13	0.0	6095
188.	mb+oh=h2o+mb4j	5.25E+09	1.0	1590
189.	mb+oh=h2o+mb3j	4.68E+07	1.6	-35
190.	mb+oh=h2o+mb2j	3.00E+06	2.0	-1520
191.	mb+oh=h2o+mbmj	7.10E+06	1.8	-596
192.	mb+ho2=h2o2+mb4j	8.40E+12	0.0	20440
193.	mb+ho2=h2o2+mb3j	5.60E+12	0.0	17690
194.	mb+ho2=h2o2+mb2j	6.40E+03	2.6	12400
195.	mb+ho2=h2o2+mbmj	9.64E+10	0.0	12580
196.	mb+hco=mb4j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
197.	mb+hco=mb3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
198.	mb+hco=mb2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
199.	mb+hco=mbmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
200.	mb+ch3=ch4+mb4j	4.52E-01	3.6	7154
201.	mb+ch3=ch4+mb3j	2.70E+04	2.3	7287
202.	mb+ch3=ch4+mb2j	1.00E+11	0.0	7300
203.	mb+ch3=ch4+mbmj	4.52E-01	3.6	7154
204.	mb+ch3o=ch3oh+mb4j	1.58E+11	0.0	7000
205.	mb+ch3o=ch3oh+mb3j	1.10E+11	0.0	5000
206.	mb+ch3o=ch3oh+mb2j	1.78E+12	0.0	1200
207.	mb+ch3o=ch3oh+mbmj	1.58E+11	0.0	7000
208.	mb+ch2oh=mb4j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
209.	mb+ch2oh=mb3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
210.	mb+ch2oh=mb2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
211.	mb+ch2oh=mbmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
212.	mb+ch3o2=ch3o2h+mb4j	8.40E+12	0.0	20440
213.	mb+ch3o2=ch3o2h+mb3j	5.60E+12	0.0	17690
214.	mb+ch3o2=ch3o2h+mb2j	4.00E+12	0.0	14000
215.	mb+ch3o2=ch3o2h+mbmj	8.40E+12	0.0	20440
216.	mb+c2h3=c2h4+mb4j	5.01E+11	0.0	18000
217.	mb+c2h3=c2h4+mb3j	4.00E+11	0.0	14800
218.	mb+c2h3=c2h4+mb2j	4.00E+11	0.0	14300
219.	mb+c2h3=c2h4+mbmj	5.01E+11	0.0	18000
220.	mb+c2h5=c2h6+mb4j	5.01E+10	0.0	13400
221.	mb+c2h5=c2h6+mb3j	5.00E+10	0.0	10400
222.	mb+c2h5=c2h6+mb2j	2.20E+00	3.5	4140
223.	mb+c2h5=c2h6+mbmj	5.01E+10	0.0	13400
224.	mb+c3h5-a=mb4j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
225.	mb+c3h5-a=mb3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
226.	mb+c3h5-a=mb2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
227.	mb+c3h5-a=mbmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
228.	mb+mb2j=mb4j+mb	1.20E+02	3.3	19840
229.	mb+mb2j=mb3j+mb	8.00E+01	3.3	18170
230.	mb+mb2j=mbmj+mb	1.20E+02	3.3	19840
231.	mb+mb4oo=mb4ooh+mb4j	2.80E+12	0.0	20440
232.	mb+mb4oo=mb4ooh+mb3j	1.87E+12	0.0	17690
233.	mb+mb4oo=mb4ooh+mb2j	2.16E+12	0.0	14400
234.	mb+mb4oo=mb4ooh+mbmj	2.80E+12	0.0	20440
235.	mb+mb3oo=mb3ooh+mb4j	2.80E+12	0.0	20440
236.	mb+mb3oo=mb3ooh+mb3j	1.87E+12	0.0	17690
237.	mb+mb3oo=mb3ooh+mb2j	2.16E+12	0.0	14400
238.	mb+mb3oo=mb3ooh+mbmj	2.80E+12	0.0	20440
239.	mb+mb2oo=mb2ooh+mb4j	2.80E+12	0.0	20440
240.	mb+mb2oo=mb2ooh+mb3j	1.87E+12	0.0	17690
241.	mb+mb2oo=mb2ooh+mb2j	2.16E+12	0.0	14400
242.	mb+mb2oo=mb2ooh+mbmj	2.80E+12	0.0	20440
243.	mb+mbmoo=mbmooh+mb4j	2.80E+12	0.0	20440
244.	mb+mbmoo=mbmooh+mb3j	1.87E+12	0.0	17690
245.	mb+mbmoo=mbmooh+mb2j	2.16E+12	0.0	14400
246.	mb+mbmoo=mbmooh+mbmj	2.80E+12	0.0	20440
247.	mb2j=ch3o+c2h5chco	1.46E+12	0.6	53276
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.58E+01	2.8	5973
248.	mb2j=mp2d+ch3	1.33E+11	1.0	34882
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.09E+02	2.8	5845
249.	mb3j=c3h6+ch3oco	4.53E+12	0.3	34269
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.55E+01	3.0	4665
250.	mb4j=c2h4+me2j	5.25E+11	0.5	26591
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.41E+02	2.9	7533
251.	mbmj=ch2o+nc3h7co	1.23E+13	0.4	36714
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.11E+01	3.1	11198
252.	mb2d+h=mb2j	2.51E+11	0.5	2620
253.	mb2d-z+h=mb2j	2.51E+11	0.5	2620
254.	mb4j=h+mb3d	3.00E+13	0.0	38000
255.	mb3j=h+mb3d	3.00E+13	0.0	38000
256.	mb3j=h+mb2d-z	1.60E+13	0.0	34800
257.	mb4j=mbmj	4.35E+06	1.0	24900
258.	mb3j=mbmj	2.50E+07	1.0	19500
259.	mb2j=mbmj	1.50E+08	1.0	24800
260.	ch2o+mp3j=mb4o	1.50E+11	0.0	11900
261.	ch3cho+me2j=mb3o	1.50E+11	0.0	11900
262.	c2h5cho+ch3oco=mb2o	1.50E+11	0.0	11900
263.	ch2o+baoj=mbmo	1.50E+11	0.0	11900
264.	me2*o+c2h5=mb2o	1.50E+11	0.0	11900
265.	mp3*o+ch3=mb3o	1.50E+11	0.0	11900
266.	mb4*o+h=mb4o	6.63E+09	1.1	4226
267.	mbm*o+h=mbmo	6.63E+09	1.1	4226
268.	mb3d+ho2=mb4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
269.	mb2d+ho2=mb3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
270.	mb3d+ho2=mb3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
271.	mb2d+ho2=mb2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
272.	mb4ooh2j=>mp2d+ch2o+oh	1.02E+20	-1.6	33380
273.	mb2ooh4j=>me2*o+c2h4+oh	5.92E+19	-1.9	30290
274.	mb4ooh2j=>mbcy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
275.	mb2ooh4j=>mbcy4o2+oh	4.47E+11	0.0	21900
276.	mb2oohmj=>mbcy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
277.	mbmooh2j=>mbcy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
278.	mbcy4o2+h=>mp2d+hco+h2	1.92E+09	1.5	2785
279.	mbcy2om+h=>co2+sc3h5och2+h2	4.80E+08	1.5	2005
280.	mbcy4o2+oh=>mp2d+hco+h2o	9.60E+06	2.0	-1192
281.	mbcy2om+oh=>co2+sc3h5och2+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
282.	mbcy4o2+ho2=>mp2d+hco+h2o2	1.60E+13	0.0	14398
283.	mbcy2om+ho2=>co2+sc3h5och2+h2o2	4.00E+12	0.0	13261
284.	mb4ooh3oo=>mb3ooh4*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
285.	mb4ooh2oo=>mb2ooh4*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
286.	mb3ooh4oo=>mb4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
287.	mb3ooh2oo=>mb2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
288.	mb2ooh4oo=>mb4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
289.	mb2ooh3oo=>mb3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
290.	mb2oohmoo=>mbmooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
291.	mbmooh2oo=>mb2oohm*o+oh	2.90E+06	1.0	28500
292.	mb4ooh2*o=>ch2o+mp3j2*o+oh	1.00E+16	0.0	43000
293.	mb4ooh3*o=>ch2o+mp3j*o+oh	1.00E+16	0.0	43000
294.	mbmooh2*o=>ch2o+baoj2*o+oh	1.00E+16	0.0	43000
295.	mb3ooh2*o=>mp3*o2*o+ch3+oh	1.00E+16	0.0	43000
296.	mb3ooh4*o=>me2j+chocho+oh	1.00E+16	0.0	43000
297.	mb2ooh3*o=>ch3co+me2*o+oh	1.00E+16	0.0	43000

298.	mb2ooh3*o=>ch3cocho+ch3oco+oh	1.00E+16	0.0	43000
299.	mb2ooh4*o=>me2*o+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
300.	mb2oohm*o=>chococo+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
301.	mb3d+h=mb3d2j+h2	3.70E+13	0.0	3900
302.	mb3d+oh=mb3d2j+h2o	3.00E+13	0.0	1230
303.	mb3d+ho2=mb3d2j+h2o2	1.50E+11	0.0	14190
304.	mb3d+ch3=mb3d2j+ch4	1.00E+12	0.0	7300
305.	mb3d+h=mb3dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
306.	mb3d+o=mb3dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
307.	mb3d+oh=mb3dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
308.	mb3d+ho2=mb3dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
309.	mb3d+ch3=mb3dmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
310.	mb3d+ch3o=mb3dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
311.	mb2d+h=mb2dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
312.	mb2d+o=mb2dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
313.	mb2d+oh=mb2dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
314.	mb2d+ho2=mb2dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
315.	mb2d+ch3=mb2dmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
316.	mb2d+ch3o=mb2dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
317.	mb2d-z+h=mb2dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
318.	mb2d-z+o=mb2dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
319.	mb2d-z+oh=mb2dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
320.	mb2d-z+ho2=mb2dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
321.	mb2d-z+ch3=mb2dmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
322.	mb2d-z+ch3o=mb2dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
323.	mb2d+h=mb3d2j+h2	1.74E+05	2.5	2510
324.	mb2d+o=mb3d2j+oh	1.74E+11	0.7	5900
325.	mb2d+oh=mb3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
326.	mb2d+ho2=mb3d2j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
327.	mb2d+ch3=mb3d2j+ch4	2.22E+00	3.5	5670
328.	mb2d+ch3o=mb3d2j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
329.	mb2d-z+h=mb3d2j+h2	1.74E+05	2.5	2510
330.	mb2d-z+o=mb3d2j+oh	1.74E+11	0.7	5900
331.	mb2d-z+oh=mb3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
332.	mb2d-z+ho2=mb3d2j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
333.	mb2d-z+ch3=mb3d2j+ch4	2.22E+00	3.5	5670
334.	mb2d-z+ch3o=mb3d2j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
335.	mb2d+h=mb2d3j+h2	4.10E+05	2.5	9790
336.	mb2d+o=mb2d3j+oh	6.00E+10	0.7	7630
337.	mb2d+oh=mb2d3j+h2o	1.10E+06	2.0	1450
338.	mb2d+ch3=mb2d3j+ch4	9.80E-01	3.5	11700
339.	mb2d-z+h=mb2d3j+h2	4.10E+05	2.5	9790
340.	mb2d-z+o=mb2d3j+oh	6.00E+10	0.7	7630
341.	mb2d-z+oh=mb2d3j+h2o	1.10E+06	2.0	1450
342.	mb2d-z+ch3=mb2d3j+ch4	9.80E-01	3.5	11700
343.	mb3d2j+oh=mb3d+o	7.00E+11	0.0	29900
344.	mb3d2j+o=ch2o+mp2d3j	1.58E+07	1.8	-1216
345.	mb4j+ho2=mb3d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
346.	mb3j+ho2=mb3d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
347.	mb3j+ho2=mb2d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
348.	mb2j+ho2=mb2d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
349.	mb3d+o=mp3j+hco	1.58E+07	1.8	-1216
350.	mb3d+o=me2j+ch2cho	2.50E+07	1.8	76
351.	mb3d+o=>c2h3cho+h+ch3oco	2.50E+07	1.8	76
352.	mb2d+o=me2j+ch3co	1.58E+07	1.8	-1216
353.	mb2d+o=ch3oco+ch3chcho	5.01E+07	1.8	76
354.	mb3d2j=ch2chchco+ch3o	2.50E+13	0.0	45000
355.	mb2dmj=ch2o+sc3h5co	1.64E+22	-2.3	31950
356.	mb3dmj=>ch2o+ac3h5co	1.64E+22	-2.3	31950
357.	mb2d3j=>c3h4-p+ch3oco	2.00E+13	0.0	30000
358.	mb3d2j=mb3dmj	1.50E+08	1.0	27800
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	17800
359.	ch2chchco+h=cjhchchco+h2	4.21E-03	4.6	2583
360.	ch2chchco+oh=cjhchchco+h2o	1.01E+13	0.0	5955
361.	ch2chchco+ch3=cjhchchco+ch4	3.31E+00	3.7	9500
362.	ch2chchco+o=cjhchchco+oh	1.20E+11	0.7	8959
363.	ch2chchco+ho2=cjhchchco+h2o2	8.50E+13	0.0	30430
364.	ch2chchco+h=co+c3h5-a	1.10E+13	0.0	3400
365.	ch2chchco+h=c2h4+hcco	1.10E+13	0.0	3400
366.	ch2chchco+oh=hcco+ch3cho	3.73E+12	0.0	-1013
367.	ch2chchco+oh=ch3chcho+co	3.73E+12	0.0	-1013
368.	c2h2+hcco=cjhchchco	1.61E+40	-8.6	20331
369.	c2h3+hcco=ch2chchco	8.00E+12	0.0	0
370.	c2h5chco+h=nc3h7co	1.00E+13	0.0	2900
371.	ch2co+c2h5=nc3h7co	1.00E+11	0.0	7600
372.	ch3+c2h3co=c2h5chco	1.00E+13	0.0	0
373.	co2+c3h5-s=baoj2d	1.00E+11	0.0	39360
374.	mpe=mpe5j+h	7.90E+15	0.0	97970
375.	mpe=mpe4j+h	5.00E+15	0.0	94990
376.	mpe=mpe3j+h	5.00E+15	0.0	94990
377.	mpe2j+h=mpe	1.00E+14	0.0	0
378.	mpe=mpemj+h	7.90E+15	0.0	97970
379.	mpe=mb4j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
380.	mpe=mp3j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
381.	mpe=me2j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
382.	mpe=ch3oco+pc4h9	1.13E+16	0.0	81700
383.	nc4h9co+ch3o=mpe	1.50E+13	0.0	0
384.	mpe=peaoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
385.	mpe+o2=mpe5j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
386.	mpe+o2=mpe4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
387.	mpe+o2=mpe3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
388.	mpe+o2=mpe2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
389.	mpe+o2=mpemj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
390.	co2+pc4h9=peaoj	1.00E+11	0.0	39360
391.	mpe+h=mpe5j+h2	9.40E+04	2.8	6280
392.	mpe+h=mpe4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
393.	mpe+h=mpe3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
394.	mpe+h=mpe2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
395.	mpe+h=mpemj+h2	1.44E+13	0.0	6095
396.	mpe+o=mpe5j+oh	9.65E+04	2.7	3716
397.	mpe+o=mpe4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
398.	mpe+o=mpe3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
399.	mpe+o=mpe2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
400.	mpe+o=mpemj+oh	9.65E+04	2.7	3716
401.	mpe+oh=mpe5j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
402.	mpe+oh=mpe4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
403.	mpe+oh=mpe3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
404.	mpe+oh=mpe2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
405.	mpe+oh=mpemj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
406.	mpe+ho2=mpe5j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
407.	mpe+ho2=mpe4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
408.	mpe+ho2=mpe3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
409.	mpe+ho2=mpe2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
410.	mpe+ho2=mpemj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
411.	mpe+hco=mpe5j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
412.	mpe+hco=mpe4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
413.	mpe+hco=mpe3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
414.	mpe+hco=mpe2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
415.	mpe+hco=mpemj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
416.	mpe+ch3=mpe5j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
417.	mpe+ch3=mpe4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
418.	mpe+ch3=mpe3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
419.	mpe+ch3=mpe2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
420.	mpe+ch3=mpemj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
421.	mpe+ch3o=mpe5j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
422.	mpe+ch3o=mpe4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
423.	mpe+ch3o=mpe3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
424.	mpe+ch3o=mpe2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
425.	mpe+ch3o=mpemj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
426.	mpe+ch2oh=mpe5j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
427.	mpe+ch2oh=mpe4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
428.	mpe+ch2oh=mpe3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
429.	mpe+ch2oh=mpe2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
430.	mpe+ch2oh=mpemj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
431.	mpe+ch3o2=mpe5j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
432.	mpe+ch3o2=mpe4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
433.	mpe+ch3o2=mpe3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
434.	mpe+ch3o2=mpe2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
435.	mpe+ch3o2=mpemj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
436.	mpe+c2h3=mpe5j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
437.	mpe+c2h3=mpe4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
438.	mpe+c2h3=mpe3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
439.	mpe+c2h3=mpe2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
440.	mpe+c2h3=mpemj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
441.	mpe+c2h5=mpe5j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
442.	mpe+c2h5=mpe4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
443.	mpe+c2h5=mpe3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
444.	mpe+c2h5=mpe2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
445.	mpe+c2h5=mpemj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
446.	mpe+c3h5-a=mpe5j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
447.	mpe+c3h5-a=mpe4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
448.	mpe+c3h5-a=mpe3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
449.	mpe+c3h5-a=mpe2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
450.	mpe+c3h5-a=mpemj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
451.	mpe+mpe2j=mpe5j+mpe	1.20E+02	3.3	19840
452.	mpe+mpe2j=mpe4j+mpe	8.00E+01	3.3	18170
453.	mpe+mpe2j=mpe3j+mpe	8.00E+01	3.3	18170
454.	mpe+mpe2j=mpemj+mpe	1.20E+02	3.3	19840
455.	mpe5j=c2h4+mp3j	2.00E+13	0.0	28700
456.	mpe4j=c3h6+me2j	2.00E+13	0.0	25700
457.	mpe3j=c4h8-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
458.	mpe3j=ch3+mb3d	2.00E+13	0.0	31000
459.	mpe2j=c2h5+mp2d	2.00E+13	0.0	31700
460.	mpe2j=c4h8co+ch3o	1.46E+12	0.6	53276
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.58E+01	2.8	5973
461.	mpemj=ch2o+nc4h9co	1.64E+22	-2.3	31950
462.	mpe5j=h+mpe4d	3.00E+13	0.0	38000
463.	mpe4j=h+mpe4d	3.00E+13	0.0	39000
464.	mpe4j=h+mpe3d	3.00E+13	0.0	38000
465.	mpe3j=h+mpe3d	3.00E+13	0.0	38000
466.	mpe3j=h+mpe2d	3.20E+13	0.0	34800
467.	mpe2j=h+mpe2d	3.00E+13	0.0	38000
468.	mpe4j=mpemj	4.35E+06	1.0	17900
469.	mpe3j=mpemj	2.50E+07	1.0	17500
470.	mpe2j=mpe5j	1.50E+08	1.0	19800
471.	mpe2j=mpemj	1.50E+08	1.0	24800
472.	mpe5j+o2=mpe4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
473.	mpe4j+o2=mpe4d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
474.	mpe4j+o2=mpe3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
475.	mpe3j+o2=mpe3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
476.	mpe3j+o2=mpe2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
477.	mpe2j+o2=mpe2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
478.	mpe4d=me2j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
479.	c2h3+mp3j=mpe4d	2.05E+13	0.0	0
480.	mpe4d3j+h=mpe4d	1.00E+13	0.0	0
481.	mpe4d2j+h=mpe4d	1.00E+13	0.0	0
482.	mpe3d2j+h=mpe3d	1.00E+13	0.0	0
483.	mpe4d+o2=mpe4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
484.	mpe4d+o2=mpe4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
485.	mpe3d+o2=mpe4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
486.	mpe3d+o2=mpe3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
487.	mpe2d+o2=mpe3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
488.	mpe4d+o=mpe4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
489.	mpe4d+o=mpe4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
490.	mpe3d+o=mpe4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
491.	mpe3d+o=mpe3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
492.	mpe2d+o=mpe3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
493.	mpe4d+h=mpe4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
494.	mpe4d+h=mpe4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
495.	mpe3d+h=mpe4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
496.	mpe3d+h=mpe3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
497.	mpe2d+h=mpe3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
498.	mpe4d+oh=mpe4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
499.	mpe4d+oh=mpe4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
500.	mpe3d+oh=mpe4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
501.	mpe3d+oh=mpe3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
502.	mpe2d+oh=mpe3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
503.	mpe4d+ho2=mpe4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
504.	mpe4d+ho2=mpe4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
505.	mpe3d+ho2=mpe4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
506.	mpe3d+ho2=mpe3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
507.	mpe2d+ho2=mpe3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
508.	mpe4d+ch3o=mpe4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
509.	mpe4d+ch3o=mpe4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
510.	mpe3d+ch3o=mpe4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
511.	mpe3d+ch3o=mpe3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
512.	mpe2d+ch3o=mpe3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
513.	mpe4d+o=mb4j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
514.	mpe3d+o=mp3j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
515.	mpe2d+o=me2j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
516.	mpe4d3j=ch3oco+c4h6	1.30E+13	0.0	35900
517.	mpe4d2j=mp2d+c2h3	1.00E+12	0.0	50000
518.	mpe4d3j=mpe4d2d+h	3.00E+13	0.0	51500
519.	mpe4d2j=mpe4d2d+h	3.16E+13	0.0	34780
520.	mpe4d2d+oh=h2o+nc4h5+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
521.	mpe4d2d+h=h2+nc4h5+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
522.	mpe4d2d+o=oh+nc4h5+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
523.	mhx=mhx6j+h	7.90E+15	0.0	97970
524.	mhx=mhx5j+h	5.00E+15	0.0	94990
525.	mhx=mhx4j+h	5.00E+15	0.0	94990
526.	mhx=mhx3j+h	5.00E+15	0.0	94990
527.	mhx2j+h=mhx	1.00E+14	0.0	0
528.	mhx=mhxmj+h	7.90E+15	0.0	93970
529.	mhx=mpe5j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
530.	mhx=mb4j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
531.	mhx=mp3j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
532.	mhx=me2j+pc4h9	1.58E+17	0.0	87040
533.	mhx=ch3oco+c5h11-1	1.13E+16	0.0	81700
534.	c5h11co+ch3o=mhx	1.50E+13	0.0	0
535.	mhx=hxaoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
536.	mhx+o2=mhx6j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
537.	mhx+o2=mhx5j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
538.	mhx+o2=mhx4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
539.	mhx+o2=mhx3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
540.	mhx+o2=mhx2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
541.	mhx+o2=mhxmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
542.	co2+c5h11-1=hxaoj	1.00E+11	0.0	39360
543.	mhx+h=mhx6j+h2	9.40E+04	2.8	6280
544.	mhx+h=mhx5j+h2	1.30E+06	2.4	4471
545.	mhx+h=mhx4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
546.	mhx+h=mhx3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
547.	mhx+h=mhx2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
548.	mhx+h=mhxmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
549.	mhx+o=mhx6j+oh	9.65E+04	2.7	3716
550.	mhx+o=mhx5j+oh	4.77E+04	2.7	2106
551.	mhx+o=mhx4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
552.	mhx+o=mhx3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
553.	mhx+o=mhx2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
554.	mhx+o=mhxmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
555.	mhx+oh=mhx6j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
556.	mhx+oh=mhx5j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
557.	mhx+oh=mhx4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
558.	mhx+oh=mhx3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
559.	mhx+oh=mhx2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
560.	mhx+oh=mhxmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
561.	mhx+ho2=mhx6j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
562.	mhx+ho2=mhx5j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
563.	mhx+ho2=mhx4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
564.	mhx+ho2=mhx3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
565.	mhx+ho2=mhx2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
566.	mhx+ho2=mhxmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
567.	mhx+hco=mhx6j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
568.	mhx+hco=mhx5j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
569.	mhx+hco=mhx4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
570.	mhx+hco=mhx3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
571.	mhx+hco=mhx2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
572.	mhx+hco=mhxmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
573.	mhx+ch3=mhx6j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
574.	mhx+ch3=mhx5j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
575.	mhx+ch3=mhx4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
576.	mhx+ch3=mhx3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
577.	mhx+ch3=mhx2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
578.	mhx+ch3=mhxmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
579.	mhx+ch3o=mhx6j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
580.	mhx+ch3o=mhx5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
581.	mhx+ch3o=mhx4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
582.	mhx+ch3o=mhx3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
583.	mhx+ch3o=mhx2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
584.	mhx+ch3o=mhxmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
585.	mhx+ch2oh=mhx6j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
586.	mhx+ch2oh=mhx5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
587.	mhx+ch2oh=mhx4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
588.	mhx+ch2oh=mhx3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
589.	mhx+ch2oh=mhx2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
590.	mhx+ch2oh=mhxmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
591.	mhx+ch3o2=mhx6j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
592.	mhx+ch3o2=mhx5j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
593.	mhx+ch3o2=mhx4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
594.	mhx+ch3o2=mhx3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
595.	mhx+ch3o2=mhx2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
596.	mhx+ch3o2=mhxmj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
597.	mhx+c2h3=mhx6j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
598.	mhx+c2h3=mhx5j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
599.	mhx+c2h3=mhx4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
600.	mhx+c2h3=mhx3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
601.	mhx+c2h3=mhx2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
602.	mhx+c2h3=mhxmj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
603.	mhx+c2h5=mhx6j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
604.	mhx+c2h5=mhx5j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
605.	mhx+c2h5=mhx4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
606.	mhx+c2h5=mhx3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
607.	mhx+c2h5=mhx2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140

608. mhx+c2h5=mhxmj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
609. mhx+c3h5-a=mhx6j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
610. mhx+c3h5-a=mhx5j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
611. mhx+c3h5-a=mhx4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
612. mhx+c3h5-a=mhx3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
613. mhx+c3h5-a=mhx2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
614. mhx+c3h5-a=mhxmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
615. mhx+mhx2j=mhx6j+mhx	1.20E+02	3.3	19840
616. mhx+mhx2j=mhx5j+mhx	8.00E+01	3.3	18170
617. mhx+mhx2j=mhx4j+mhx	8.00E+01	3.3	18170
618. mhx+mhx2j=mhx3j+mhx	8.00E+01	3.3	18170
619. mhx+mhx2j=mhxmj+mhx	1.20E+02	3.3	19840
620. mhx+mhx6oo=mhx6j+mhx6ooh	2.80E+12	0.0	20440
621. mhx+mhx6oo=mhx5j+mhx6ooh	1.87E+12	0.0	17690
622. mhx+mhx6oo=mhx4j+mhx6ooh	1.87E+12	0.0	17690
623. mhx+mhx6oo=mhx3j+mhx6ooh	1.87E+12	0.0	17690
624. mhx+mhx6oo=mhx2j+mhx6ooh	1.00E+12	0.0	14550
625. mhx+mhx6oo=mhxmj+mhx6ooh	2.80E+12	0.0	20440
626. mhx+mhx5oo=mhx6j+mhx5ooh	2.80E+12	0.0	20440
627. mhx+mhx5oo=mhx5j+mhx5ooh	1.87E+12	0.0	17690
628. mhx+mhx5oo=mhx4j+mhx5ooh	1.87E+12	0.0	17690
629. mhx+mhx5oo=mhx3j+mhx5ooh	1.87E+12	0.0	17690
630. mhx+mhx5oo=mhx2j+mhx5ooh	1.00E+12	0.0	14550
631. mhx+mhx5oo=mhxmj+mhx5ooh	2.80E+12	0.0	20440
632. mhx+mhx4oo=mhx6j+mhx4ooh	2.80E+12	0.0	20440
633. mhx+mhx4oo=mhx5j+mhx4ooh	1.87E+12	0.0	17690
634. mhx+mhx4oo=mhx4j+mhx4ooh	1.87E+12	0.0	17690
635. mhx+mhx4oo=mhx3j+mhx4ooh	1.87E+12	0.0	17690
636. mhx+mhx4oo=mhx2j+mhx4ooh	1.00E+12	0.0	14550
637. mhx+mhx4oo=mhxmj+mhx4ooh	2.80E+12	0.0	20440
638. mhx+mhx3oo=mhx6j+mhx3ooh	2.80E+12	0.0	20440
639. mhx+mhx3oo=mhx5j+mhx3ooh	1.87E+12	0.0	17690
640. mhx+mhx3oo=mhx4j+mhx3ooh	1.87E+12	0.0	17690
641. mhx+mhx3oo=mhx3j+mhx3ooh	1.87E+12	0.0	17690
642. mhx+mhx3oo=mhx2j+mhx3ooh	1.00E+12	0.0	14550
643. mhx+mhx3oo=mhxmj+mhx3ooh	2.80E+12	0.0	20440
644. mhx+mhx2oo=mhx6j+mhx2ooh	2.80E+12	0.0	20440
645. mhx+mhx2oo=mhx5j+mhx2ooh	1.87E+12	0.0	17690
646. mhx+mhx2oo=mhx4j+mhx2ooh	1.87E+12	0.0	17690
647. mhx+mhx2oo=mhx3j+mhx2ooh	1.87E+12	0.0	17690
648. mhx+mhx2oo=mhx2j+mhx2ooh	1.00E+12	0.0	14550
649. mhx+mhx2oo=mhxmj+mhx2ooh	2.80E+12	0.0	20440
650. mhx+mhxmoo=mhx6j+mhxmooh	2.80E+12	0.0	20440
651. mhx+mhxmoo=mhx5j+mhxmooh	1.87E+12	0.0	17690
652. mhx+mhxmoo=mhx4j+mhxmooh	1.87E+12	0.0	17690
653. mhx+mhxmoo=mhx3j+mhxmooh	1.87E+12	0.0	17690
654. mhx+mhxmoo=mhx2j+mhxmooh	1.00E+12	0.0	14550
655. mhx+mhxmoo=mhxmj+mhxmooh	2.80E+12	0.0	20440
656. mhx6j=c2h4+mb4j	2.00E+13	0.0	28700
657. mhx5j=c3h6+mp3j	2.00E+13	0.0	28700
658. mhx4j=c4h8-1+me2j	2.00E+13	0.0	25700
659. mhx4j=ch3+mpe4d	2.00E+13	0.0	31000
660. mhx3j=c5h10-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
661. mhx3j=c2h5+mb3d	2.00E+13	0.0	28700
662. mhx3j=nc3h7+mp2d	2.00E+13	0.0	28700
663. c5h10co+ch3o=mhx2j	5.00E+11	0.0	-1000
664. mhxmj=ch2o+c5h11co	1.64E+22	-2.3	31950
665. mhx6j=h+mhx5d	3.00E+13	0.0	38000
666. mhx5j=h+mhx5d	3.00E+13	0.0	39000
667. mhx5j=h+mhx4d	3.00E+13	0.0	38000
668. mhx4j=h+mhx4d	3.00E+13	0.0	38000
669. mhx4j=>h+mhx3d	3.00E+13	0.0	38000
670. mhx3j=>h+mhx3d	3.00E+13	0.0	38000
671. h+mhx3d=>mhx4j	1.32E+13	0.0	3260
672. h+mhx3d=>mhx3j	1.32E+13	0.0	3260
673. mhx3j=h+mhx2d	3.20E+13	0.0	34800
674. mhx2j=h+mhx2d	3.00E+13	0.0	50000
675. mhx6j=mhx3j	9.90E+07	1.0	17300
676. mhx4j=mhxmj	4.35E+06	1.0	19900
677. mhx3j=mhxmj	2.50E+07	1.0	14500
678. mhx2j=mhx6j	2.50E+07	1.0	14500
679. mhx2j=mhx5j	9.90E+07	1.0	17300
680. mhx2j=mhxmj	1.50E+08	1.0	19800
681. mhx6oo=mhx6ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
682. mhx6oo=mhx6ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
683. mhx6oo=mhx6ooh3j	2.90E+06	1.0	22000
684. mhx6oo=mhx6ooh2j	5.16E+05	1.0	18000
685. mhx5oo=mhx5ooh6j	1.50E+08	1.0	35500

686. mhx5oo=mhx5ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
687. mhx5oo=mhx5ooh3j	1.70E+07	1.0	25000
688. mhx5oo=mhx5ooh2j	2.90E+06	1.0	19000
689. mhx4oo=mhx4ooh6j	2.50E+07	1.0	28000
690. mhx4oo=mhx4ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
691. mhx4oo=mhx4ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
692. mhx4oo=mhx4ooh2j	1.70E+07	1.0	20000
693. mhx3oo=mhx3ooh6j	4.35E+06	1.0	25000
694. mhx3oo=mhx3ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
695. mhx3oo=mhx3ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
696. mhx3oo=mhx3ooh2j	9.90E+07	1.0	29500
697. mhx2oo=mhx2ooh6j	7.74E+05	1.0	24000
698. mhx2oo=mhx2ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
699. mhx2oo=mhx2ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
700. mhx2oo=mhx2ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
701. mhx2oo=mhx2oohmj	4.35E+06	1.0	28500
702. mhxmoo=mhxmooh2j	2.90E+06	1.0	21700
703. mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
704. mhx5ooh6oo=>mhx6ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
705. mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
706. mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
707. mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
708. mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
709. mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
710. mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2oo	7.27E+09	0.0	12700
711. mhx6j+o2=mhx5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
712. mhx5j+o2=mhx5d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
713. mhx5j+o2=mhx4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
714. mhx4j+o2=mhx4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
715. mhx4j+o2=mhx3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
716. mhx3j+o2=mhx3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
717. mhx3j+o2=mhx2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
718. mhx2j+o2=mhx2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
719. mhx6j+o2=mhx6oo	9.00E+18	-2.5	0
720. mhx5j+o2=mhx5oo	1.70E+19	-2.5	0
721. mhx4j+o2=mhx4oo	1.80E+19	-2.5	0
722. mhx3j+o2=mhx3oo	1.05E+19	-2.5	0
723. mhx2j+o2=mhx2oo	1.20E+10	0.0	-2300
724. mhxmj+o2=mhxmoo	3.50E+11	0.0	-1700
725. mhx6ooh5j+o2=mhx6ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
726. mhx6ooh4j+o2=mhx6ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
727. mhx6ooh3j+o2=mhx6ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
728. mhx6ooh2j+o2=mhx6ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
729. mhx5ooh6j+o2=mhx5ooh6oo	1.50E+18	-2.5	0
730. mhx5ooh4j+o2=mhx5ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
731. mhx5ooh3j+o2=mhx5ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
732. mhx5ooh2j+o2=mhx5ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
733. mhx4ooh6j+o2=mhx4ooh6oo	9.00E+18	-2.5	0
734. mhx4ooh5j+o2=mhx4ooh5oo	9.50E+18	-2.5	0
735. mhx4ooh3j+o2=mhx4ooh3oo	3.00E+18	-2.5	0
736. mhx4ooh2j+o2=mhx4ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
737. mhx3ooh6j+o2=mhx3ooh6oo	9.00E+18	-2.5	0
738. mhx3ooh5j+o2=mhx3ooh5oo	1.70E+19	-2.5	0
739. mhx3ooh4j+o2=mhx3ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
740. mhx3ooh2j+o2=mhx3ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
741. mhx2ooh6j+o2=mhx2ooh6oo	9.00E+18	-2.5	0
742. mhx2ooh5j+o2=mhx2ooh5oo	1.70E+19	-2.5	0
743. mhx2ooh4j+o2=mhx2ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
744. mhx2ooh3j+o2=mhx2ooh3oo	1.00E+19	-2.5	0
745. mhx2oohmj+o2=mhx2oohmoo	3.50E+11	0.0	-1700
746. mhxmooh2j+o2=mhxmooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
747. mhx6oo+h2o2=mhx6ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
748. mhx6ooh+ho2=mhx6oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
749. mhx5oo+h2o2=mhx5ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
750. mhx5ooh+ho2=mhx5oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
751. mhx4oo+h2o2=mhx4ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
752. mhx4ooh+ho2=mhx4oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
753. mhx3oo+h2o2=mhx3ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
754. mhx3ooh+ho2=mhx3oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
755. mhx2oo+h2o2=mhx2ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
756. mhx2ooh+ho2=mhx2oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
757. mhxmoo+h2o2=mhxmooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
758. mhxmooh+ho2=mhxmoo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
759. mhx6oo+ho2=mhx6ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
760. mhx5oo+ho2=mhx5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
761. mhx4oo+ho2=mhx4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
762. mhx3oo+ho2=mhx3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
763. mhx2oo+ho2=mhx2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790

764. mhxmoo+ho2=mhxmooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
765. mhx6oo+mhx6oo=>mhx6o+mhx6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
766. mhx6oo+mhx5oo=>mhx6o+mhx5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
767. mhx6oo+mhx4oo=>mhx6o+mhx4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
768. mhx6oo+mhx3oo=>mhx6o+mhx3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
769. mhx6oo+mhx2oo=>mhx6o+mhx2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
770. mhx6oo+mhxmoo=>mhx6o+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
771. mhx5oo+mhx5oo=>mhx5o+mhx5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
772. mhx5oo+mhx4oo=>mhx5o+mhx4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
773. mhx5oo+mhx3oo=>mhx5o+mhx3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
774. mhx5oo+mhx2oo=>mhx5o+mhx2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
775. mhx5oo+mhxmoo=>mhx5o+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
776. mhx4oo+mhx4oo=>mhx4o+mhx4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
777. mhx4oo+mhx3oo=>mhx4o+mhx3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
778. mhx4oo+mhx2oo=>mhx4o+mhx2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
779. mhx4oo+mhxmoo=>mhx4o+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
780. mhx3oo+mhx3oo=>mhx3o+mhx3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
781. mhx3oo+mhx2oo=>mhx3o+mhx2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
782. mhx3oo+mhxmoo=>mhx3o+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
783. mhx2oo+mhx2oo=>mhx2o+mhx2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
784. mhx2oo+mhxmoo=>mhx2o+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
785. mhxmoo+mhxmoo=>mhxmo+mhxmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
786. mhx6oo+ch3o2=>mhx6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
787. mhx5oo+ch3o2=>mhx5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
788. mhx4oo+ch3o2=>mhx4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
789. mhx3oo+ch3o2=>mhx3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
790. mhx2oo+ch3o2=>mhx2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
791. mhxmoo+ch3o2=>mhxmo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
792. ho2+mhx6j=oh+mhx6o	7.00E+12	0.0	-1000
793. ho2+mhx5j=oh+mhx5o	7.00E+12	0.0	-1000
794. ho2+mhx4j=oh+mhx4o	7.00E+12	0.0	-1000
795. ho2+mhx3j=oh+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
796. ho2+mhx2j=oh+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
797. ho2+mhxmj=oh+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
798. mhx6oo+mhx6j=mhx6o+mhx6o	7.00E+12	0.0	-1000
799. mhx6oo+mhx5j=mhx6o+mhx5o	7.00E+12	0.0	-1000
800. mhx6oo+mhx4j=mhx6o+mhx4o	7.00E+12	0.0	-1000
801. mhx6oo+mhx3j=mhx6o+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
802. mhx6oo+mhx2j=mhx6o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
803. mhx6oo+mhxmj=mhx6o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
804. mhx5oo+mhx5j=mhx5o+mhx5o	7.00E+12	0.0	-1000
805. mhx5oo+mhx4j=mhx5o+mhx4o	7.00E+12	0.0	-1000
806. mhx5oo+mhx3j=mhx5o+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
807. mhx5oo+mhx2j=mhx5o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
808. mhx5oo+mhxmj=mhx5o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
809. mhx4oo+mhx4j=mhx4o+mhx4o	7.00E+12	0.0	-1000
810. mhx4oo+mhx3j=mhx4o+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
811. mhx4oo+mhx2j=mhx4o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
812. mhx4oo+mhxmj=mhx4o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
813. mhx3oo+mhx3j=mhx3o+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
814. mhx3oo+mhx2j=mhx3o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
815. mhx3oo+mhxmj=mhx3o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
816. mhx2oo+mhx2j=mhx2o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
817. mhx2oo+mhxmj=mhx2o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
818. mhxmoo+mhxmj=mhxmo+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
819. mhx6oo+ch3=mhx6o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
820. mhx5oo+ch3=mhx5o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
821. mhx4oo+ch3=mhx4o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
822. mhx3oo+ch3=mhx3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
823. mhx2oo+ch3=mhx2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
824. mhxmoo+ch3=mhxmo+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
825. ch3o2+mhx6j=ch3o+mhx6o	7.00E+12	0.0	-1000
826. ch3o2+mhx5j=ch3o+mhx5o	7.00E+12	0.0	-1000
827. ch3o2+mhx4j=ch3o+mhx4o	7.00E+12	0.0	-1000
828. ch3o2+mhx3j=ch3o+mhx3o	7.00E+12	0.0	-1000
829. ch3o2+mhx2j=ch3o+mhx2o	7.00E+12	0.0	-1000
830. ch3o2+mhxmj=ch3o+mhxmo	7.00E+12	0.0	-1000
831. mhx6ooh=mhx6o+oh	1.50E+16	0.0	42500
832. mhx5ooh=mhx5o+oh	9.45E+15	0.0	41600
833. mhx4ooh=mhx4o+oh	9.45E+15	0.0	41600
834. mhx3ooh=mhx3o+oh	9.45E+15	0.0	41600
835. mhx2ooh=mhx2o+oh	5.95E+15	0.0	42540
836. mhxmooh=mhxmo+oh	1.50E+16	0.0	42500
837. ch2o+mpe5j=mhx6o	1.50E+11	0.0	11900
838. ch3cho+mb4j=mhx5o	1.50E+11	0.0	11900
839. ch3+mpe5*o=mhx5o	1.50E+11	0.0	11900
840. c2h5cho+mp3j=mhx4o	1.50E+11	0.0	11900
841. c2h5+mb4*o=mhx4o	1.50E+11	0.0	11900

842. nc3h7cho+me2j=mhx3o	1.50E+11	0.0	11900
843. nc3h7+mp3*o=mhx3o	1.50E+11	0.0	11900
844. nc4h9cho+ch3oco=mhx2o	1.50E+11	0.0	11900
845. pc4h9+me2*o=mhx2o	1.50E+11	0.0	11900
846. ch2o+hxaoj=mhxmo	1.50E+11	0.0	11900
847. mhx6*o+h=mhx6o	6.63E+09	1.1	4226
848. mhxm*o+h=mhxmo	6.63E+09	1.1	4226
849. mhx6j+ho2=mhx5d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
850. mhx5j+ho2=mhx5d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
851. mhx5j+ho2=mhx4d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
852. mhx4j+ho2=mhx4d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
853. mhx4j+ho2=mhx3d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
854. mhx3j+ho2=mhx3d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
855. mhx3j+ho2=mhx2d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
856. mhx2j+ho2=mhx2d+h2o2	2.41E+13	0.0	0
857. mhx5d+ho2=mhx6ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
858. mhx5d+ho2=mhx5ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
859. mhx4d+ho2=mhx5ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
860. mhx4d+ho2=mhx4ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
861. mhx3d+ho2=mhx4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
862. mhx3d+ho2=mhx3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
863. mhx2d+ho2=mhx3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
864. mhx2d+ho2=mhx2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
865. mhx6ooh4j=>mpe4d+ch2o+oh	2.00E+13	0.0	31000
866. mhx6ooh3j=>mb3d+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700
867. mhx6ooh2j=>mp2d+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700
868. mhx5ooh3j=>mb3d+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
869. mhx5ooh2j=>mp2d+c3h6+ho2	2.00E+13	0.0	28700
870. mhx4ooh6j=>mb4*o+c2h4+oh	2.00E+13	0.0	28700
871. mhx4ooh2j=>mp2d+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
872. mhx3ooh6j=>mb3d+c2h4+ho2	2.00E+13	0.0	28700
873. mhx3ooh5j=>mp3*o+c3h6+oh	2.00E+13	0.0	28700
874. mhx2ooh6j=>mb2ooh4j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
875. mhx2ooh5j=>mp2d+c3h6+ho2	2.00E+13	0.0	28700
876. mhx2ooh4j=>me2*o+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
877. mhx6ooh4j=>mhxcy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
878. mhx6ooh3j=>mhxcy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
879. mhx6ooh2j=>mhxcy6o2+oh	1.70E+08	0.0	1950
880. mhx5ooh3j=>mhxcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
881. mhx5ooh2j=>mhxcy5o2+oh	2.57E+10	0.0	11500
882. mhx4ooh6j=>mhxcy6o4+oh	4.47E+11	0.0	21900
883. mhx4ooh2j=>mhxcy4o2+oh	3.31E+11	0.0	17400
884. mhx3ooh6j=>mhxcy6o3+oh	5.13E+10	0.0	14800
885. mhx3ooh5j=>mhxcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
886. mhx2ooh6j=>mhxcy6o2+oh	1.70E+08	0.0	1950
887. mhx2ooh5j=>mhxcy5o2+oh	3.63E+10	0.0	13000
888. mhx2ooh4j=>mhxcy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
889. mhx2oohmj=>mhxcy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
890. mhxmooh2j=>mhxcy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
891. mhxcy6o4+h=>mb4j*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
892. mhxcy6o4+h=>mpe4d+hco+h2	4.80E+08	1.5	2785
893. mhxcy6o3+h=>mb4j3*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
894. mhxcy6o3+h=>mb3d+ch2cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
895. mhxcy6o2+h=>mp2d+c2h4cho+h2	9.60E+08	1.5	2785
896. mhxcy5o3+h=>mp3j*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
897. mhxcy5o3+h=>mb3d+ch3co+h2	2.40E+08	1.5	2005
898. mhxcy5o2+h=>mp2d+ch3coch2+h2	9.60E+08	1.5	2005
899. mhxcy4o2+h=>mp2d+c2h5co+h2	9.60E+08	1.5	2005
900. mhxcy2om+h=>c5h10co+ocho+h2	4.80E+08	1.5	2785
901. mhxcy6o4+oh=>mb4j*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
902. mhxcy6o4+oh=>mpe4d+hco+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
903. mhxcy6o3+oh=>mb4j3*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
904. mhxcy6o3+oh=>mb3d+ch2cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
905. mhxcy6o2+oh=>mp2d+c2h4cho+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
906. mhxcy5o3+oh=>mp3j*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
907. mhxcy5o3+oh=>mb3d+ch3co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
908. mhxcy5o2+oh=>mp2d+ch3coch2+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
909. mhxcy4o2+oh=>mp2d+c2h5co+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
910. mhxcy2om+oh=>c5h10co+ocho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
911. mhxcy6o4+ho2=>mb4j*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	14400
912. mhxcy6o4+ho2=>mpe4d+hco+h2o2	4.00E+12	0.0	13260
913. mhxcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	14400
914. mhxcy6o3+ho2=>mb3d+ch2cho+h2o2	4.00E+12	0.0	13260
915. mhxcy6o2+ho2=>mp2d+c2h4cho+h2o2	1.00E+13	0.0	13260
916. mhxcy5o3+ho2=>mp3j*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
917. mhxcy5o3+ho2=>mb3d+ch3co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
918. mhxcy5o2+ho2=>mp2d+ch3coch2+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
919. mhxcy4o2+ho2=>mp2d+c2h5co+h2o2	8.00E+12	0.0	13260

920.	mhxcy2om+ho2=>c5h10co+ocho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
921.	mhxcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
922.	mhxcy6o4+ch3o=>mpe4d+hco+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
923.	mhxcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
924.	mhxcy6o3+ch3o=>mb3d+ch2cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
925.	mhxcy6o2+ch3o=>mp2d+c2h4cho+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
926.	mhxcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
927.	mhxcy5o3+ch3o=>mb3d+ch3co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
928.	mhxcy5o2+ch3o=>mp2d+ch3cooh2+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
929.	mhxcy4o2+ch3o=>mp2d+c2h5co+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
930.	mhxcy2om+ch3o=>c5h10co+ocho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
931.	mhxcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
932.	mhxcy6o4+ch3o2=>mpe4d+hco+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
933.	mhxcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
934.	mhxcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch2cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
935.	mhxcy6o2+ch3o2=>mp2d+c2h4cho+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
936.	mhxcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
937.	mhxcy5o3+ch3o2=>mb3d+ch3co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
938.	mhxcy5o2+ch3o2=>mp2d+ch3cooh2+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
939.	mhxcy4o2+ch3o2=>mp2d+c2h5co+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
940.	mhxcy2om+ch3o2=>c5h10co+ocho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
941.	mhx6ooh5oo=>mhx5ooh6*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
942.	mhx6ooh4oo=>mhx4ooh6*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
943.	mhx6ooh3oo=>mhx3ooh6*o+oh	2.90E+06	1.0	20000
944.	mhx6ooh2oo=>mhx2ooh6*o+oh	5.16E+05	1.0	19000
945.	mhx5ooh6oo=>mhx5ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
946.	mhx5ooh4oo=>mhx4ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
947.	mhx5ooh3oo=>mhx3ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
948.	mhx5ooh2oo=>mhx2ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
949.	mhx4ooh6oo=>mhx6ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
950.	mhx4ooh5oo=>mhx5ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
951.	mhx4ooh3oo=>mhx3ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
952.	mhx4ooh2oo=>mhx2ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
953.	mhx3ooh6oo=>mhx6ooh3*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
954.	mhx3ooh5oo=>mhx5ooh3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
955.	mhx3ooh4oo=>mhx4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
956.	mhx3ooh2oo=>mhx2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
957.	mhx2ooh6oo=>mhx6ooh2*o+oh	2.60E+05	1.0	14000
958.	mhx2ooh5oo=>mhx5ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	15000
959.	mhx2ooh4oo=>mhx4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
960.	mhx2ooh3oo=>mhx3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
961.	mhx2ooh2oo=>mhx2ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
962.	mhxmooh2oo=>mhx2ooh*o+oh	2.90E+06	1.0	28500
963.	mhx5ooh6*o=>mpe5*o+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000
964.	mhx4ooh6*o=>mb4*o+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
965.	mhx3ooh6*o=>me2j+choc2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
966.	mhx2ooh6*o=>ch3oco+choc3h6cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
967.	mhx6ooh5*o=>mpe5j*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
968.	mhx4ooh5*o=>mb4*o+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000
969.	mhx3ooh5*o=>mp3*o+ch3cooh2+oh	1.00E+16	0.0	43000
970.	mhx3ooh5*o=>me2j+c4ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
971.	mhx2ooh5*o=>ch3oco+c5ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
972.	mhx6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
973.	mhx5ooh4*o=>mb4j*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
974.	mhx3ooh4*o=>mp3*o+c2h5co+oh	1.00E+16	0.0	43000
975.	mhx3ooh4*o=>me2j+c4ald2oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
976.	mhx2ooh4*o=>ch3oco+c5ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
977.	mhx6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
978.	mhx5ooh3*o=>mb4j3*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
979.	mhx4ooh3*o=>mp3j*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
980.	mhx2ooh3*o=>ch3oco+c5ald2oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
981.	mhx6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
982.	mhx5ooh2*o=>mb4j2*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
983.	mhx4ooh2*o=>mp3j2*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
984.	mhx3ooh2*o=>me2j*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
985.	mhxmooh2*o=>hxaoj2*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
986.	mhx2oohm*o=>chooco+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
987.	mhx3d-z=mhx3d	3.62E+13	0.0	61330
988.	mhx5d=me2j+c4h7-4	1.58E+17	0.0	87040
989.	mhx5d=mp3j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
990.	c2h3+mb4j=mhx5d	2.05E+13	0.0	0
991.	mhx5d=c5h915+ch3oco	1.13E+16	0.0	81700
992.	mhx5d=c2h4+mb3d	3.16E+12	0.0	57430
993.	mhx3d=ch3oco+c5h913	1.13E+16	0.0	81700
994.	mhx3d-z=ch3oco+c5h913	1.13E+16	0.0	81700
995.	c5h9co+ch3o=mhx3d	1.50E+13	0.0	0
996.	c5h9co+ch3o=mhx3d-z	1.50E+13	0.0	0
997.	mhx5d4j+h=mhx5d	1.00E+13	0.0	0
998.	mhx5d2j+h=mhx5d	1.00E+13	0.0	0
999.	mhx4d3j+h=mhx4d	1.00E+13	0.0	0
1000.	mhx3d2j+h=mhx3d	1.00E+13	0.0	0
1001.	mhx3d2j+h=mhx3d-z	1.00E+13	0.0	0
1002.	mhx5d+o2=mhx5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
1003.	mhx5d+o2=mhx5d2j+ho2	4.00E+13	0.0	41200
1004.	mhx4d+o2=mhx5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
1005.	mhx4d+o2=mhx4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
1006.	mhx4d+o2=mhx4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	41200
1007.	mhx3d+o2=mhx4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
1008.	mhx3d+o2=mhx3dmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
1009.	mhx3d-z+o2=mhx4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	40000
1010.	mhx3d-z+o2=mhx3dmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
1011.	mhx3d+o2=c2h5cho+mp3*o	2.00E+08	1.5	30200
1012.	mhx3d-z+o2=c2h5cho+mp3*o	2.00E+08	1.5	30200
1013.	mhx5d+o=mhx5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1014.	mhx5d+o=mhx5d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1015.	mhx5d+h=mhx5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1016.	mhx5d+h=mhx5d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1017.	mhx5d+oh=mhx5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1018.	mhx5d+oh=mhx5d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1019.	mhx5d+ho2=mhx5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1020.	mhx5d+ho2=mhx5d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1021.	mhx5d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1022.	mhx5d+ch3o=mhx5d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1023.	mhx4d+o=mhx5d4j+oh	1.74E+11	0.7	5900
1024.	mhx4d+o=mhx4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1025.	mhx4d+o=mhx4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1026.	mhx4d+h=mhx5d4j+h2	1.74E+05	2.5	2510
1027.	mhx4d+h=mhx4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1028.	mhx4d+h=mhx4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1029.	mhx4d+oh=mhx5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
1030.	mhx4d+oh=mhx4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1031.	mhx4d+oh=mhx4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1032.	mhx4d+ho2=mhx5d4j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
1033.	mhx4d+ho2=mhx4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1034.	mhx4d+ho2=mhx4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1035.	mhx4d+ch3o=mhx5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1036.	mhx4d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1037.	mhx4d+ch3o=mhx4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1038.	mhx3d+o=mhx4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1039.	mhx3d+o=mhx3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1040.	mhx3d+o=mhx3dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
1041.	mhx3d+h=mhx4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1042.	mhx3d+h=mhx3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1043.	mhx3d+h=mhx3dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
1044.	mhx3d+oh=mhx4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1045.	mhx3d+oh=mhx3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1046.	mhx3d+oh=mhx3dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
1047.	mhx3d+ho2=mhx4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1048.	mhx3d+ho2=mhx3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1049.	mhx3d+ho2=mhx3dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
1050.	mhx3d+ch3o=mhx4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1051.	mhx3d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1052.	mhx3d+ch3o=mhx3dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1053.	mhx3d-z+o=mhx4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1054.	mhx3d-z+o=mhx3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1055.	mhx3d-z+o=mhx3dmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
1056.	mhx3d-z+h=mhx4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1057.	mhx3d-z+h=mhx3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1058.	mhx3d-z+h=mhx3dmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
1059.	mhx3d-z+oh=mhx4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1060.	mhx3d-z+oh=mhx3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1061.	mhx3d-z+oh=mhx3dmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
1062.	mhx3d-z+ho2=mhx4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1063.	mhx3d-z+ho2=mhx3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1064.	mhx3d-z+ho2=mhx3dmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
1065.	mhx3d-z+ch3o=mhx4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1066.	mhx3d-z+ch3o=mhx3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1067.	mhx3d-z+ch3o=mhx3dmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1068.	mhx2d+o=mhx3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1069.	mhx2d+h=mhx3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1070.	mhx2d+oh=mhx3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1071.	mhx2d+ho2=mhx3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1072.	mhx2d+ch3o=mhx3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1073.	mhx5d+o=mpe5j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
1074.	mhx4d+o=mb4j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
1075.	mhx3d+o=mp3j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
1076.	mhx3d-z+o=mp3j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
1077.	mhx2d+o=me2j+nc3h7co	1.00E+11	0.0	-1050
1078.	mhx5d4j=c4h6+me2j	1.30E+13	0.0	33900
1079.	mhx5d2j=c3h5-a+mp2d	3.30E+13	0.0	22500
1080.	c5h8co+ch3o=mhx5d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1081.	mhx4d3j=c5h813+ch3oco	2.00E+13	0.0	34000
1082.	mhx4d2j=c3h5-a+mp2d	3.30E+13	0.0	22500
1083.	c5h8co+ch3o=mhx4d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1084.	mhx3d2j=mpe4d2d+ch3	2.00E+13	0.0	34000
1085.	c5h8co+ch3o=mhx3d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1086.	mhx3dmj=>ch2o+c5h9co	1.64E+22	-2.3	31950
1087.	mhx5d+oh=mhx5oh6j	2.76E+12	0.0	-1042
1088.	mhx4d+oh=mhx4oh5j	2.76E+12	0.0	-1042
1089.	mhx3d+oh=mhx3oh4j	2.76E+12	0.0	-1042
1090.	mhx3d-z+oh=mhx3oh4j	2.76E+12	0.0	-1042
1091.	mhx2d+oh=mhx2oh3j	2.76E+12	0.0	-1042
1092.	mhx5oh6j+o2=mhx5oh6oo	1.00E+12	0.0	-1100
1093.	mhx4oh5j+o2=mhx4oh5oo	1.00E+12	0.0	-1100
1094.	mhx3oh4j+o2=mhx3oh4oo	1.00E+12	0.0	-1100
1095.	mhx2oh3j+o2=mhx2oh3oo	1.00E+12	0.0	-1100
1096.	mhx5oh6oo=>mpe5*o+oh+ch2o	1.00E+12	0.0	28680
1097.	mhx4oh5oo=>mb4*o+oh+ch3cho	1.00E+12	0.0	28680
1098.	mhx3oh4oo=>mp3*o+oh+c2h5cho	1.00E+12	0.0	28680
1099.	mhx2oh3oo=>me2*o+oh+nc3h7cho	1.00E+12	0.0	28680
1100.	mhx3oh4j=nc3h7cho+me2j	6.00E+13	0.0	22000
1101.	mhx3oh4j=c2h5+mb4*o	6.00E+13	0.0	22000
1102.	mhx3d2j=mhx3dmj	1.50E+08	1.0	19800
1103.	mhx4d3j=mhx3d2j	1.00E+08	1.0	51400
1104.	mhx3d2j+ho2=>ch3oco+c4h8co+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1105.	mhx3d2j+ho2=>c4h7-1+me2*o+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1106.	mhx3d2j+ho2=>c2h5cho+mp2d3j+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1107.	mhx4d3j+ho2=>ch3cho+mb3d4j+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1108.	mhx4d3j+ho2=>c3h5-s+mp3*o+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1109.	mhx4d3j+ho2=>ac3h5cho+me2j+oh	7.00E+12	0.0	-1000
1110.	mhx3d2j+o2=mhx3d2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1111.	mhx3d2j+o2=mhx2d4oo	1.20E+10	0.0	-2300
1112.	mhx4d3j+o2=mhx4d3oo	1.20E+10	0.0	-2300
1113.	mhx4d3j+o2=mhx3d5oo	1.20E+10	0.0	-2300
1114.	mhx3d2oo+ho2=mhx3d2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1115.	mhx3d2oo=c3h6cho-3+me2*o	1.70E+09	1.0	13200
1116.	mhx3d2ooh=mhx3d2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1117.	mhx3d2oo+ch3o2=>mhx3d2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1118.	c4h8co+ch3oco=mhx3d2o	1.50E+11	0.0	11900
1119.	c4h7-1+me2*o=mhx3d2o	1.50E+11	0.0	18900
1120.	mhx2d4oo+ho2=mhx2d4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1121.	mhx2d4o=c2h5cho+mp3j*o	1.70E+09	1.0	13200
1122.	mhx2d4ooh=mhx2d4o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1123.	mhx2d4oo+ch3o2=>mhx2d4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1124.	c2h5cho+mp2d3j=mhx2d4o	1.50E+11	0.0	18900
1125.	mhx4d3oo+ho2=mhx4d3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1126.	mhx4d3oo=ch3chcho+mp3*o	1.70E+09	1.0	13200
1127.	mhx4d3ooh=mhx4d3o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1128.	mhx4d3oo+ch3o2=>mhx4d3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1129.	ac3h5cho+me2j=mhx4d3o	1.50E+11	0.0	11900
1130.	c3h5-s+mp3*o=mhx4d3o	1.50E+11	0.0	18900
1131.	mhx3d5oo+ho2=mhx3d5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1132.	mhx3d5oo=ch3cho+mb4j*o	1.70E+09	1.0	13200
1133.	mhx3d5ooh=mhx3d5o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1134.	mhx3d5oo+ch3o2=>mhx3d5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1135.	mb3d4j+ch3cho=mhx3d5o	1.50E+11	0.0	18900
1136.	mhx5d3d+oh=h2o+c2h2+c3h5-a+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
1137.	mhx5d3d+h=h2+c2h2+c3h5-a+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
1138.	mhx5d3d+o=oh+c2h2+c3h5-a+ch2o+co	2.00E+11	0.0	0
1139.	hco+mpe5j=mhx6*o	1.00E+13	0.0	0
1140.	mhx6*o+o2=mhx6j*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
1141.	mhx6*o+h=mhx6j*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
1142.	mhx6*o+oh=mhx6j*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
1143.	mhx6*o+o=mhx6j*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
1144.	mhx6*o+ho2=mhx6j*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
1145.	mhx6j*o=>mpe5j+co	1.83E+15	-0.7	12910
1146.	mhx6j5*o=>ch2co+mb4j	1.00E+13	0.0	28000
1147.	mhx6j5*o+o2=mhx6oo5*o	9.00E+18	-2.5	0
1148.	mhx6oo5*o+ho2=mhx6ooh5*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1149.	mhx6ooh5*o=mhx6o5*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1150.	mhx6oo5*o+ch3o2=>mhx6o5*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1151.	ch2o+mpe5j*o=mhx6o5*o	1.50E+11	0.0	11900
1152.	c2h4+mb4j*o=mhx6j4*o	2.11E+11	0.0	7350
1153.	mhx6j4*o+o2=mhx6oo4*o	9.00E+18	-2.5	0
1154.	mhx6oo4*o+ho2=mhx6ooh4*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1155.	mhx6ooh4*o=mhx6o4*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1156.	mhx6oo4*o+ch3o2=>mhx6o4*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1157.	ch2o+mpe5j4*o=mhx6o4*o	1.50E+11	0.0	11900
1158.	mhx6j3*o=c2h4+mb4j3*o	2.00E+13	0.0	28700
1159.	mhx6j3*o+o2=mhx6oo3*o	9.00E+18	-2.5	0
1160.	mhx6oo3*o+ho2=mhx6ooh3*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1161.	mhx6ooh3*o=mhx6o3*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1162.	mhx6oo3*o+ch3o2=>mhx6o3*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1163.	ch2o+mpe5j3*o=mhx6o3*o	1.50E+11	0.0	11900
1164.	mhp=mhp7j+h	7.90E+15	0.0	97970
1165.	mhp=mhp6j+h	5.00E+15	0.0	94990
1166.	mhp=mhp5j+h	5.00E+15	0.0	94990
1167.	mhp=mhp4j+h	5.00E+15	0.0	94990
1168.	mhp=mhp3j+h	5.00E+15	0.0	94990
1169.	mhp2j+h=mhp	1.00E+14	0.0	0
1170.	mhp=mhpmj+h	7.90E+15	0.0	93970
1171.	mhp=mhx6j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
1172.	mhp=mpe5j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
1173.	mhp=mb4j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
1174.	mhp=mp3j+pc4h9	1.58E+17	0.0	87040
1175.	mhp=me2j+c5h11-1	1.58E+17	0.0	87040
1176.	mhp=ch3oco+c6h13-1	1.13E+16	0.0	81700
1177.	c6h13co+ch3o=mhp	1.50E+13	0.0	0
1178.	mhp=hpaoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
1179.	mhp+o2=mhp7j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
1180.	mhp+o2=mhp6j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1181.	mhp+o2=mhp5j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1182.	mhp+o2=mhp4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1183.	mhp+o2=mhp3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1184.	mhp+o2=mhp2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1185.	mhp+o2=mhpmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
1186.	co2+c6h13-1=hpaoj	1.00E+11	0.0	39360
1187.	mhp+h=mhp7j+h2	9.40E+04	2.8	6280
1188.	mhp+h=mhp6j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1189.	mhp+h=mhp5j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1190.	mhp+h=mhp4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1191.	mhp+h=mhp3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1192.	mhp+h=mhp2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1193.	mhp+h=mhpmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
1194.	mhp+o=mhp7j+oh	9.65E+04	2.7	3716
1195.	mhp+o=mhp6j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1196.	mhp+o=mhp5j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1197.	mhp+o=mhp4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1198.	mhp+o=mhp3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1199.	mhp+o=mhp2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1200.	mhp+o=mhpmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
1201.	mhp+oh=mhp7j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
1202.	mhp+oh=mhp6j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1203.	mhp+oh=mhp5j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1204.	mhp+oh=mhp4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1205.	mhp+oh=mhp3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1206.	mhp+oh=mhp2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1207.	mhp+oh=mhpmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
1208.	mhp+ho2=mhp7j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
1209.	mhp+ho2=mhp6j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1210.	mhp+ho2=mhp5j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1211.	mhp+ho2=mhp4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1212.	mhp+ho2=mhp3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1213.	mhp+ho2=mhp2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1214.	mhp+ho2=mhpmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
1215.	mhp+hco=mhp7j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
1216.	mhp+hco=mhp6j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1217.	mhp+hco=mhp5j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1218.	mhp+hco=mhp4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1219.	mhp+hco=mhp3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1220.	mhp+hco=mhp2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
1221.	mhp+hco=mhpmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
1222.	mhp+ch3=mhp7j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
1223.	mhp+ch3=mhp6j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1224.	mhp+ch3=mhp5j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1225.	mhp+ch3=mhp4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1226.	mhp+ch3=mhp3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1227.	mhp+ch3=mhp2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
1228.	mhp+ch3=mhpmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
1229.	mhp+ch3o=mhp7j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1230.	mhp+ch3o=mhp6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1231.	mhp+ch3o=mhp5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000

1232. mhp+ch3o=mhp4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1233. mhp+ch3o=mhp3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1234. mhp+ch3o=mhp2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
1235. mhp+ch3o=mhpmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1236. mhp+ch2oh=mhp7j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1237. mhp+ch2oh=mhp6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1238. mhp+ch2oh=mhp5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1239. mhp+ch2oh=mhp4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1240. mhp+ch2oh=mhp3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1241. mhp+ch2oh=mhp2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
1242. mhp+ch2oh=mhpmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1243. mhp+ch3o2=mhp7j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
1244. mhp+ch3o2=mhp6j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1245. mhp+ch3o2=mhp5j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1246. mhp+ch3o2=mhp4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1247. mhp+ch3o2=mhp3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1248. mhp+ch3o2=mhp2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
1249. mhp+ch3o2=mhpmj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
1250. mhp+c2h3=mhp7j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
1251. mhp+c2h3=mhp6j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1252. mhp+c2h3=mhp5j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1253. mhp+c2h3=mhp4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1254. mhp+c2h3=mhp3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1255. mhp+c2h3=mhp2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
1256. mhp+c2h3=mhpmj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
1257. mhp+c2h5=mhp7j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
1258. mhp+c2h5=mhp6j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1259. mhp+c2h5=mhp5j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1260. mhp+c2h5=mhp4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1261. mhp+c2h5=mhp3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1262. mhp+c2h5=mhp2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
1263. mhp+c2h5=mhpmj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
1264. mhp+c3h5-a=mhp7j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
1265. mhp+c3h5-a=mhp6j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
1266. mhp+c3h5-a=mhp5j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
1267. mhp+c3h5-a=mhp4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
1268. mhp+c3h5-a=mhp3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
1269. mhp+c3h5-a=mhp2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
1270. mhp+c3h5-a=mhpmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
1271. mhp+mhp2j=mhp7j+mhp	1.20E+02	3.3	19840
1272. mhp+mhp2j=mhp6j+mhp	8.00E+01	3.3	18170
1273. mhp+mhp2j=mhp5j+mhp	8.00E+01	3.3	18170
1274. mhp+mhp2j=mhp4j+mhp	8.00E+01	3.3	18170
1275. mhp+mhp2j=mhp3j+mhp	8.00E+01	3.3	18170
1276. mhp+mhp2j=mhpmj+mhp	1.20E+02	3.3	19840
1277. mhp+mhp7oo=mhp7j+mhp7ooh	2.80E+12	0.0	20440
1278. mhp+mhp7oo=mhp6j+mhp7ooh	1.87E+12	0.0	17690
1279. mhp+mhp7oo=mhp5j+mhp7ooh	1.87E+12	0.0	17690
1280. mhp+mhp7oo=mhp4j+mhp7ooh	1.87E+12	0.0	17690
1281. mhp+mhp7oo=mhp3j+mhp7ooh	1.87E+12	0.0	17690
1282. mhp+mhp7oo=mhp2j+mhp7ooh	1.00E+12	0.0	14550
1283. mhp+mhp7oo=mhpmj+mhp7ooh	2.80E+12	0.0	20440
1284. mhp+mhp6oo=mhp7j+mhp6ooh	2.80E+12	0.0	20440
1285. mhp+mhp6oo=mhp6j+mhp6ooh	1.87E+12	0.0	17690
1286. mhp+mhp6oo=mhp5j+mhp6ooh	1.87E+12	0.0	17690
1287. mhp+mhp6oo=mhp4j+mhp6ooh	1.87E+12	0.0	17690
1288. mhp+mhp6oo=mhp3j+mhp6ooh	1.87E+12	0.0	17690
1289. mhp+mhp6oo=mhp2j+mhp6ooh	1.00E+12	0.0	14550
1290. mhp+mhp6oo=mhpmj+mhp6ooh	2.80E+12	0.0	20440
1291. mhp+mhp5oo=mhp7j+mhp5ooh	2.80E+12	0.0	20440
1292. mhp+mhp5oo=mhp6j+mhp5ooh	1.87E+12	0.0	17690
1293. mhp+mhp5oo=mhp5j+mhp5ooh	1.87E+12	0.0	17690
1294. mhp+mhp5oo=mhp4j+mhp5ooh	1.87E+12	0.0	17690
1295. mhp+mhp5oo=mhp3j+mhp5ooh	1.87E+12	0.0	17690
1296. mhp+mhp5oo=mhp2j+mhp5ooh	1.00E+12	0.0	14550
1297. mhp+mhp5oo=mhpmj+mhp5ooh	2.80E+12	0.0	20440
1298. mhp+mhp4oo=mhp7j+mhp4ooh	2.80E+12	0.0	20440
1299. mhp+mhp4oo=mhp6j+mhp4ooh	1.87E+12	0.0	17690
1300. mhp+mhp4oo=mhp5j+mhp4ooh	1.87E+12	0.0	17690
1301. mhp+mhp4oo=mhp4j+mhp4ooh	1.87E+12	0.0	17690
1302. mhp+mhp4oo=mhp3j+mhp4ooh	1.87E+12	0.0	17690
1303. mhp+mhp4oo=mhp2j+mhp4ooh	1.00E+12	0.0	14550
1304. mhp+mhp4oo=mhpmj+mhp4ooh	2.80E+12	0.0	20440
1305. mhp+mhp3oo=mhp7j+mhp3ooh	2.80E+12	0.0	20440
1306. mhp+mhp3oo=mhp6j+mhp3ooh	1.87E+12	0.0	17690
1307. mhp+mhp3oo=mhp5j+mhp3ooh	1.87E+12	0.0	17690
1308. mhp+mhp3oo=mhp4j+mhp3ooh	1.87E+12	0.0	17690
1309. mhp+mhp3oo=mhp3j+mhp3ooh	1.87E+12	0.0	17690

1310. mhp+mhp3oo=mhp2j+mhp3ooh	1.00E+12	0.0	14550
1311. mhp+mhp3oo=mhpmj+mhp3ooh	2.80E+12	0.0	20440
1312. mhp+mhp2oo=mhp7j+mhp2ooh	2.80E+12	0.0	20440
1313. mhp+mhp2oo=mhp6j+mhp2ooh	1.87E+12	0.0	17690
1314. mhp+mhp2oo=mhp5j+mhp2ooh	1.87E+12	0.0	17690
1315. mhp+mhp2oo=mhp4j+mhp2ooh	1.87E+12	0.0	17690
1316. mhp+mhp2oo=mhp3j+mhp2ooh	1.87E+12	0.0	17690
1317. mhp+mhp2oo=mhp2j+mhp2ooh	1.00E+12	0.0	14550
1318. mhp+mhp2oo=mhpmj+mhp2ooh	2.80E+12	0.0	20440
1319. mhp+mhpmoo=mhp7j+mhpmooh	2.80E+12	0.0	20440
1320. mhp+mhpmoo=mhp6j+mhpmooh	1.87E+12	0.0	17690
1321. mhp+mhpmoo=mhp5j+mhpmooh	1.87E+12	0.0	17690
1322. mhp+mhpmoo=mhp4j+mhpmooh	1.87E+12	0.0	17690
1323. mhp+mhpmoo=mhp3j+mhpmooh	1.87E+12	0.0	17690
1324. mhp+mhpmoo=mhp2j+mhpmooh	1.00E+12	0.0	14550
1325. mhp+mhpmoo=mhpmj+mhpmooh	2.80E+12	0.0	20440
1326. mhp7j=c2h4+mpe5j	2.00E+13	0.0	28700
1327. mhp6j=c3h6+mb4j	2.00E+13	0.0	28700
1328. mhp5j=c4h8-1+mp3j	2.00E+13	0.0	28700
1329. mhp5j=ch3+mhx5d	1.00E+13	0.0	31000
1330. mhp4j=c5h10-1+me2j	2.00E+13	0.0	25700
1331. mhp4j=c2h5+mpe4d	2.00E+13	0.0	28700
1332. mhp3j=c6h12-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
1333. mhp3j=nc3h7+mb3d	2.00E+13	0.0	28700
1334. mhp2j=pc4h9+mp2d	2.00E+13	0.0	28700
1335. c6h12co+ch3o=mhp2j	5.00E+11	0.0	-1000
1336. mhpmj=ch2o+c6h13co	1.64E+22	-2.3	31950
1337. mhp7j=h+mhp6d	3.00E+13	0.0	38000
1338. mhp6j=h+mhp6d	3.00E+13	0.0	39000
1339. mhp6j=h+mhp5d	3.00E+13	0.0	38000
1340. mhp5j=h+mhp5d	3.00E+13	0.0	38000
1341. mhp5j=h+mhp4d	3.00E+13	0.0	38000
1342. mhp4j=h+mhp4d	3.00E+13	0.0	38000
1343. mhp4j=h+mhp3d	3.00E+13	0.0	38000
1344. mhp3j=h+mhp3d	3.00E+13	0.0	38000
1345. mhp3j=h+mhp2d	3.20E+13	0.0	34800
1346. mhp2j=h+mhp2d	3.00E+13	0.0	50000
1347. mhp7j=mhp4j	9.90E+07	1.0	17300
1348. mhp7j=mhp3j	1.70E+07	1.0	12000
1349. mhp6j=>mhp3j	9.90E+07	1.0	17300
1350. mhp4j=mhpmj	4.35E+06	1.0	24900
1351. mhp3j=>mhp6j	9.90E+07	1.0	17300
1352. mhp3j=mhpmj	2.50E+07	1.0	19500
1353. mhp2j=mhp7j	4.40E+06	1.0	19900
1354. mhp2j=mhp6j	1.70E+07	1.0	12000
1355. mhp2j=mhp5j	9.90E+07	1.0	17300
1356. mhp2j=mhpmj	1.50E+08	1.0	24800
1357. mhp7oo=mhp7ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
1358. mhp7oo=mhp7ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
1359. mhp7oo=mhp7ooh4j	2.90E+06	1.0	22000
1360. mhp7oo=mhp7ooh3j	5.16E+05	1.0	21000
1361. mhp6oo=mhp6ooh7j	1.50E+08	1.0	35500
1362. mhp6oo=mhp6ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
1363. mhp6oo=mhp6ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
1364. mhp6oo=mhp6ooh3j	2.90E+06	1.0	22000
1365. mhp6oo=mhp6ooh2j	5.16E+05	1.0	18000
1366. mhp5oo=mhp5ooh7j	2.50E+07	1.0	28000
1367. mhp5oo=mhp5ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
1368. mhp5oo=mhp5ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
1369. mhp5oo=mhp5ooh3j	1.70E+07	1.0	25000
1370. mhp5oo=mhp5ooh2j	2.90E+06	1.0	19000
1371. mhp4oo=mhp4ooh7j	4.35E+06	1.0	25000
1372. mhp4oo=mhp4ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
1373. mhp4oo=mhp4ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
1374. mhp4oo=mhp4ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
1375. mhp4oo=mhp4ooh2j	1.70E+07	1.0	20000
1376. mhp3oo=mhp3ooh7j	7.74E+05	1.0	24000
1377. mhp3oo=mhp3ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
1378. mhp3oo=mhp3ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
1379. mhp3oo=mhp3ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
1380. mhp3oo=mhp3ooh2j	9.90E+07	1.0	29500
1381. mhp2oo=mhp2ooh6j	5.16E+05	1.0	21000
1382. mhp2oo=mhp2ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
1383. mhp2oo=mhp2ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
1384. mhp2oo=mhp2ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
1385. mhp2oo=mhp2oohmj	4.35E+06	1.0	28500
1386. mhpmoo=mhpmooh2j	2.90E+06	1.0	21700
1387. mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700

1388. mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
1389. mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
1390. mhp5ooh6oo=>mhp6ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
1391. mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
1392. mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
1393. mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
1394. mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
1395. mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
1396. mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2oo	7.27E+09	0.0	12700
1397. mhp7j+o2=mhp6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1398. mhp6j+o2=mhp6d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
1399. mhp6j+o2=mhp5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1400. mhp5j+o2=mhp5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1401. mhp5j+o2=mhp4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1402. mhp4j+o2=mhp4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1403. mhp4j+o2=mhp3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1404. mhp3j+o2=mhp3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
1405. mhp3j+o2=mhp2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
1406. mhp2j+o2=mhp2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
1407. mhp7j+o2=mhp7oo	9.00E+18	-2.5	0
1408. mhp6j+o2=mhp6oo	1.70E+19	-2.5	0
1409. mhp5j+o2=mhp5oo	1.80E+19	-2.5	0
1410. mhp4j+o2=mhp4oo	1.80E+19	-2.5	0
1411. mhp3j+o2=mhp3oo	1.05E+19	-2.5	0
1412. mhp2j+o2=mhp2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1413. mhpmj+o2=mhpmoo	3.50E+11	0.0	-1700
1414. mhp7ooh6j+o2=mhp7ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
1415. mhp7ooh5j+o2=mhp7ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
1416. mhp7ooh4j+o2=mhp7ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
1417. mhp7ooh3j+o2=mhp7ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
1418. mhp6ooh7j+o2=mhp6ooh7oo	1.50E+18	-2.5	0
1419. mhp6ooh5j+o2=mhp6ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
1420. mhp6ooh4j+o2=mhp6ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
1421. mhp6ooh3j+o2=mhp6ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
1422. mhp6ooh2j+o2=mhp6ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1423. mhp5ooh7j+o2=mhp5ooh7oo	9.00E+18	-2.5	0
1424. mhp5ooh6j+o2=mhp5ooh6oo	9.50E+18	-2.5	0
1425. mhp5ooh4j+o2=mhp5ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
1426. mhp5ooh3j+o2=mhp5ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
1427. mhp5ooh2j+o2=mhp5ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1428. mhp4ooh7j+o2=mhp4ooh7oo	9.00E+18	-2.5	0
1429. mhp4ooh6j+o2=mhp4ooh6oo	1.70E+19	-2.5	0
1430. mhp4ooh5j+o2=mhp4ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
1431. mhp4ooh3j+o2=mhp4ooh3oo	3.00E+18	-2.5	0
1432. mhp4ooh2j+o2=mhp4ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1433. mhp3ooh7j+o2=mhp3ooh7oo	9.00E+18	-2.5	0
1434. mhp3ooh6j+o2=mhp3ooh6oo	1.70E+19	-2.5	0
1435. mhp3ooh5j+o2=mhp3ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
1436. mhp3ooh4j+o2=mhp3ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
1437. mhp3ooh2j+o2=mhp3ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1438. mhp2ooh6j+o2=mhp2ooh6oo	1.70E+19	-2.5	0
1439. mhp2ooh5j+o2=mhp2ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
1440. mhp2ooh4j+o2=mhp2ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
1441. mhp2ooh3j+o2=mhp2ooh3oo	1.00E+19	-2.5	0
1442. mhp2oohmj+o2=mhp2oohmoo	3.50E+11	0.0	-1700
1443. mhpmooh2j+o2=mhpmooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
1444. mhp7oo+mhp7oo=>mhp7o+mhp7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1445. mhp7oo+mhp6oo=>mhp7o+mhp6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1446. mhp7oo+mhp5oo=>mhp7o+mhp5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1447. mhp7oo+mhp4oo=>mhp7o+mhp4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1448. mhp7oo+mhp3oo=>mhp7o+mhp3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1449. mhp7oo+mhp2oo=>mhp7o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1450. mhp7oo+mhpmoo=>mhp7o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1451. mhp6oo+mhp6oo=>mhp6o+mhp6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1452. mhp6oo+mhp5oo=>mhp6o+mhp5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1453. mhp6oo+mhp4oo=>mhp6o+mhp4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1454. mhp6oo+mhp3oo=>mhp6o+mhp3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1455. mhp6oo+mhp2oo=>mhp6o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1456. mhp6oo+mhpmoo=>mhp6o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1457. mhp5oo+mhp5oo=>mhp5o+mhp5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1458. mhp5oo+mhp4oo=>mhp5o+mhp4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1459. mhp5oo+mhp3oo=>mhp5o+mhp3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1460. mhp5oo+mhp2oo=>mhp5o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1461. mhp5oo+mhpmoo=>mhp5o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1462. mhp4oo+mhp4oo=>mhp4o+mhp4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1463. mhp4oo+mhp3oo=>mhp4o+mhp3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1464. mhp4oo+mhp2oo=>mhp4o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1465. mhp4oo+mhpmoo=>mhp4o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860

1466. mhp3oo+mhp3oo=>mhp3o+mhp3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1467. mhp3oo+mhp2oo=>mhp3o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1468. mhp3oo+mhpmoo=>mhp3o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1469. mhp2oo+mhp2oo=>mhp2o+mhp2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1470. mhp2oo+mhpmoo=>mhp2o+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1471. mhpmoo+mhpmoo=>mhpmo+mhpmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1472. mhp7oo+ch3o2=>mhp7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1473. mhp6oo+ch3o2=>mhp6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1474. mhp5oo+ch3o2=>mhp5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1475. mhp4oo+ch3o2=>mhp4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1476. mhp3oo+ch3o2=>mhp3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1477. mhp2oo+ch3o2=>mhp2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1478. mhpmoo+ch3o2=>mhpmo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1479. mhp7oo+ho2=mhp7ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1480. mhp6oo+ho2=mhp6ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1481. mhp5oo+ho2=mhp5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1482. mhp4oo+ho2=mhp4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1483. mhp3oo+ho2=mhp3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1484. mhp2oo+ho2=mhp2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1485. mhpmoo+ho2=mhpmooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1486. mhp7oo+h2o2=>mhp7ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1487. mhp7ooh+ho2=>mhp7oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1488. mhp6oo+h2o2=>mhp6ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1489. mhp6ooh+ho2=>mhp6oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1490. mhp5oo+h2o2=>mhp5ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1491. mhp5ooh+ho2=>mhp5oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1492. mhp4oo+h2o2=>mhp4ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1493. mhp4ooh+ho2=>mhp4oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1494. mhp3oo+h2o2=>mhp3ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1495. mhp3ooh+ho2=>mhp3oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1496. mhp2oo+h2o2=>mhp2ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1497. mhp2ooh+ho2=>mhp2oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1498. mhpmoo+h2o2=>mhpmooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
1499. mhpmooh+ho2=>mhpmoo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
1500. mhp7oo+mhp7j=mhp7o+mhp7o	7.00E+12	0.0	-1000
1501. mhp7oo+mhp6j=mhp7o+mhp6o	7.00E+12	0.0	-1000
1502. mhp7oo+mhp5j=mhp7o+mhp5o	7.00E+12	0.0	-1000
1503. mhp7oo+mhp4j=mhp7o+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1504. mhp7oo+mhp3j=mhp7o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1505. mhp7oo+mhp2j=mhp7o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1506. mhp7oo+mhpmj=mhp7o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1507. mhp6oo+mhp6j=mhp6o+mhp6o	7.00E+12	0.0	-1000
1508. mhp6oo+mhp5j=mhp6o+mhp5o	7.00E+12	0.0	-1000
1509. mhp6oo+mhp4j=mhp6o+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1510. mhp6oo+mhp3j=mhp6o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1511. mhp6oo+mhp2j=mhp6o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1512. mhp6oo+mhpmj=mhp6o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1513. mhp5oo+mhp5j=mhp5o+mhp5o	7.00E+12	0.0	-1000
1514. mhp5oo+mhp4j=mhp5o+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1515. mhp5oo+mhp3j=mhp5o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1516. mhp5oo+mhp2j=mhp5o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1517. mhp5oo+mhpmj=mhp5o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1518. mhp4oo+mhp4j=mhp4o+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1519. mhp4oo+mhp3j=mhp4o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1520. mhp4oo+mhp2j=mhp4o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1521. mhp4oo+mhpmj=mhp4o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1522. mhp3oo+mhp3j=mhp3o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1523. mhp3oo+mhp2j=mhp3o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1524. mhp3oo+mhpmj=mhp3o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1525. mhp2oo+mhp2j=mhp2o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1526. mhp2oo+mhpmj=mhp2o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1527. mhpmoo+mhpmj=mhpmo+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1528. ho2+mhp7j=oh+mhp7o	7.00E+12	0.0	-1000
1529. ho2+mhp6j=oh+mhp6o	7.00E+12	0.0	-1000
1530. ho2+mhp5j=oh+mhp5o	7.00E+12	0.0	-1000
1531. ho2+mhp4j=oh+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1532. ho2+mhp3j=oh+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1533. ho2+mhp2j=oh+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1534. ho2+mhpmj=oh+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1535. mhp7oo+ch3=mhp7o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1536. mhp6oo+ch3=mhp6o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1537. mhp5oo+ch3=mhp5o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1538. mhp4oo+ch3=mhp4o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1539. mhp3oo+ch3=mhp3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1540. mhp2oo+ch3=mhp2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1541. mhpmoo+ch3=mhpmo+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
1542. ch3o2+mhp7j=ch3o+mhp7o	7.00E+12	0.0	-1000
1543. ch3o2+mhp6j=ch3o+mhp6o	7.00E+12	0.0	-1000

1544.	ch3o2+mhp5j=ch3o+mhp5o	7.00E+12	0.0	-1000
1545.	ch3o2+mhp4j=ch3o+mhp4o	7.00E+12	0.0	-1000
1546.	ch3o2+mhp3j=ch3o+mhp3o	7.00E+12	0.0	-1000
1547.	ch3o2+mhp2j=ch3o+mhp2o	7.00E+12	0.0	-1000
1548.	ch3o2+mhpmj=ch3o+mhpmo	7.00E+12	0.0	-1000
1549.	mhp7ooh=mhp7o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1550.	mhp6ooh=mhp6o+oh	9.45E+15	0.0	41600
1551.	mhp5ooh=mhp5o+oh	9.45E+15	0.0	41600
1552.	mhp4ooh=mhp4o+oh	9.45E+15	0.0	41600
1553.	mhp3ooh=mhp3o+oh	9.45E+15	0.0	41600
1554.	mhp2ooh=mhp2o+oh	5.95E+15	0.0	42540
1555.	mhpmooh=mhpmo+oh	1.50E+16	0.0	42500
1556.	ch2o+mhx6j=mhp7o	1.50E+11	0.0	11900
1557.	ch3cho+mpe5j=mhp6o	1.50E+11	0.0	11900
1558.	ch3+mhx6*o=mhp6o	1.50E+11	0.0	11900
1559.	c2h5cho+mb4j=mhp5o	1.50E+11	0.0	11900
1560.	c2h5+mpe5*o=mhp5o	1.50E+11	0.0	11900
1561.	nc3h7cho+mp3j=mhp4o	1.50E+11	0.0	11900
1562.	nc3h7+mb4*o=mhp4o	1.50E+11	0.0	11900
1563.	nc4h9cho+me2j=mhp3o	1.50E+11	0.0	11900
1564.	pc4h9+mp3*o=mhp3o	1.50E+11	0.0	11900
1565.	c5h11cho+ch3oco=mhp2o	1.50E+11	0.0	11900
1566.	c5h11-1+me2*o=mhp2o	1.50E+11	0.0	11900
1567.	ch2o+hpaoj=mhpmo	1.50E+11	0.0	11900
1568.	mhp7*o+h=mhp7o	6.63E+09	1.1	4226
1569.	mhpm*o+h=mhpmo	6.63E+09	1.1	4226
1570.	mhp6d+ho2=mhp7ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
1571.	mhp6d+ho2=mhp6ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
1572.	mhp5d+ho2=mhp6ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
1573.	mhp5d+ho2=mhp5ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
1574.	mhp4d+ho2=mhp5ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
1575.	mhp4d+ho2=mhp4ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
1576.	mhp3d+ho2=mhp4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
1577.	mhp3d+ho2=mhp3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
1578.	mhp2d+ho2=mhp3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
1579.	mhp2d+ho2=mhp2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
1580.	mhp7ooh5j=>mhx5d+ch2o+oh	2.00E+13	0.0	31000
1581.	mhp7ooh4j=>mpe4d+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700
1582.	mhp7ooh3j=>mb3d+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700
1583.	mhp6ooh4j=mpe4d+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
1584.	mhp6ooh3j=mb3d+prooh2-1	2.00E+13	0.0	28700
1585.	mhp6ooh2j=mp2d+c2h4+oh+ch3cho	2.00E+13	0.0	28700
1586.	mhp5ooh7j=c2h4+mpe5*o+oh	2.00E+13	0.0	28700
1587.	mhp5ooh3j=mb3d+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
1588.	mhp5ooh2j=mp2d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
1589.	mhp4ooh7j=mpe4d+c2h4+ho2	2.00E+13	0.0	28700
1590.	mhp4ooh6j=mb4*o+c3h6+oh	2.00E+13	0.0	28700
1591.	mhp4ooh2j=mp2d+nc3h7cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
1592.	mhp3ooh7j=mp3*o+oh+c2h4+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
1593.	mhp3ooh6j=mb3ooh4j+c3h6	2.00E+13	0.0	28700
1594.	mhp3ooh5j=mp3*o+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
1595.	mhp2ooh6j=mb2ooh4j+c3h6	2.00E+13	0.0	28700
1596.	mhp2ooh5j=mp2d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
1597.	mhp2ooh4j=me2*o+c5h10-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
1598.	mhp7ooh5j=>mhpcy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
1599.	mhp7ooh4j=>mhpcy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
1600.	mhp7ooh3j=>mhpcy7o3+oh	1.70E+08	0.0	1950
1601.	mhp6ooh4j=>mhpcy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
1602.	mhp6ooh3j=>mhpcy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
1603.	mhp6ooh2j=>mhpcy6o2+oh	1.70E+08	0.0	1950
1604.	mhp5ooh7j=>mhpcy7o5+oh	4.47E+11	0.0	21900
1605.	mhp5ooh3j=>mhpcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
1606.	mhp5ooh2j=>mhpcy5o2+oh	2.57E+10	0.0	11500
1607.	mhp4ooh7j=>mhpcy7o4+oh	5.13E+10	0.0	14800
1608.	mhp4ooh6j=>mhpcy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
1609.	mhp4ooh2j=>mhpcy4o2+oh	3.31E+11	0.0	17400
1610.	mhp3ooh7j=>mhpcy7o3+oh	1.70E+08	0.0	1950
1611.	mhp3ooh6j=>mhpcy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
1612.	mhp3ooh5j=>mhpcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
1613.	mhp2ooh6j=>mhpcy6o2+oh	1.70E+08	0.0	1950
1614.	mhp2ooh5j=>mhpcy5o2+oh	3.63E+10	0.0	13000
1615.	mhp2ooh4j=>mhpcy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
1616.	mhp2oohmj=>mhpcy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
1617.	mhpmooh2j=>mhpcy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
1618.	mhpcy7o5+h=>mpe5j*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
1619.	mhpcy7o5+h=>mhx5d+hco+h2	4.80E+08	1.5	2785
1620.	mhpcy7o4+h=>mpe5j4*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
1621.	mhpcy7o4+h=>mpe4d+ch2cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
1622.	mhpcy7o3+h=>mpe5j3*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
1623.	mhpcy7o3+h=>mb3d+c2h4cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
1624.	mhpcy6o4+h=>mb4j*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
1625.	mhpcy6o4+h=>mpe4d+ch3co+h2	2.40E+08	1.5	2005
1626.	mhpcy6o3+h=>mb4j3*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
1627.	mhpcy6o3+h=>mb3d+ch3coch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
1628.	mhpcy6o2+h=>mp2d+acetoch2+h2	9.60E+08	1.5	2005
1629.	mhpcy5o3+h=>mp3j*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
1630.	mhpcy5o3+h=>mb3d+c2h5co+h2	2.40E+08	1.5	2005
1631.	mhpcy5o2+h=>mp2d+c2h5coch2+h2	9.60E+08	1.5	2005
1632.	mhpcy4o2+h=>mp2d+nc3h7co+h2	9.60E+08	1.5	2005
1633.	mhpcy2om+h=>c6h12co+ocho+h2	4.80E+08	1.5	2785
1634.	mhpcy7o5+oh=>mpe5j*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1635.	mhpcy7o5+oh=>mhx5d+hco+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
1636.	mhpcy7o4+oh=>mpe5j4*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1637.	mhpcy7o4+oh=>mpe4d+ch2cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
1638.	mhpcy7o3+oh=>mpe5j3*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1639.	mhpcy7o3+oh=>mb3d+c2h4cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
1640.	mhpcy6o4+oh=>mb4j*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1641.	mhpcy6o4+oh=>mpe4d+ch3co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1642.	mhpcy6o3+oh=>mb4j3*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1643.	mhpcy6o3+oh=>mb3d+ch3coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1644.	mhpcy6o2+oh=>mp2d+acetoch2+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
1645.	mhpcy5o3+oh=>mp3j*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1646.	mhpcy5o3+oh=>mb3d+c2h5co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
1647.	mhpcy5o2+oh=>mp2d+c2h5coch2+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
1648.	mhpcy4o2+oh=>mp2d+nc3h7co+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
1649.	mhpcy2om+oh=>c6h12co+ocho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
1650.	mhpcy7o5+ho2=>mpe5j*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1651.	mhpcy7o5+ho2=>mhx5d+hco+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
1652.	mhpcy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1653.	mhpcy7o4+ho2=>mpe4d+ch2cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
1654.	mhpcy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1655.	mhpcy7o3+ho2=>mb3d+c2h4cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
1656.	mhpcy6o4+ho2=>mb4j*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1657.	mhpcy6o4+ho2=>mpe4d+ch3co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1658.	mhpcy6o3+ho2=>mb4j3*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1659.	mhpcy6o3+ho2=>mb3d+ch3coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1660.	mhpcy6o2+ho2=>mp2d+acetoch2+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
1661.	mhpcy5o3+ho2=>mp3j*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1662.	mhpcy5o3+ho2=>mb3d+c2h5co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
1663.	mhpcy5o2+ho2=>mp2d+c2h5coch2+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
1664.	mhpcy4o2+ho2=>mp2d+nc3h7co+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
1665.	mhpcy2om+ho2=>c6h12co+ocho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
1666.	mhpcy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1667.	mhpcy7o5+ch3o=>mhx5d+hco+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
1668.	mhpcy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1669.	mhpcy7o4+ch3o=>mpe4d+ch2cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
1670.	mhpcy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1671.	mhpcy7o3+ch3o=>mb3d+c2h4cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
1672.	mhpcy6o4+ch3o=>mb4j*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1673.	mhpcy6o4+ch3o=>mpe4d+ch3co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1674.	mhpcy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1675.	mhpcy6o3+ch3o=>mb3d+ch3coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1676.	mhpcy6o2+ch3o=>mp2d+acetoch2+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
1677.	mhpcy5o3+ch3o=>mp3j*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1678.	mhpcy5o3+ch3o=>mb3d+c2h5co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1679.	mhpcy5o2+ch3o=>mp2d+c2h5coch2+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
1680.	mhpcy4o2+ch3o=>mp2d+nc3h7co+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
1681.	mhpcy2om+ch3o=>c6h12co+ocho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
1682.	mhpcy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1683.	mhpcy7o5+ch3o2=>mhx5d+hco+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
1684.	mhpcy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1685.	mhpcy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch2cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
1686.	mhpcy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1687.	mhpcy7o3+ch3o2=>mb3d+c2h4cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
1688.	mhpcy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1689.	mhpcy6o4+ch3o2=>mpe4d+ch3co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1690.	mhpcy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1691.	mhpcy6o3+ch3o2=>mb3d+ch3coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1692.	mhpcy6o2+ch3o2=>mp2d+acetoch2+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
1693.	mhpcy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1694.	mhpcy5o3+ch3o2=>mb3d+c2h5co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
1695.	mhpcy5o2+ch3o2=>mp2d+c2h5coch2+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
1696.	mhpcy4o2+ch3o2=>mp2d+nc3h7co+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
1697.	mhpcy2om+ch3o2=>c6h12co+ocho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
1698.	mhp7ooh6oo=>mhp6ooh7*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
1699.	mhp7ooh5oo=>mhp5ooh7*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
1700.	mhp7ooh4oo=>mhp4ooh7*o+oh	2.90E+06	1.0	20000
1701.	mhp7ooh3oo=>mhp3ooh7*o+oh	5.16E+05	1.0	19000
1702.	mhp6ooh7oo=>mhp7ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1703.	mhp6ooh5oo=>mhp5ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1704.	mhp6ooh4oo=>mhp4ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1705.	mhp6ooh3oo=>mhp3ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
1706.	mhp6ooh2oo=>mhp2ooh6*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
1707.	mhp5ooh7oo=>mhp7ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1708.	mhp5ooh6oo=>mhp6ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1709.	mhp5ooh4oo=>mhp4ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1710.	mhp5ooh3oo=>mhp3ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1711.	mhp5ooh2oo=>mhp2ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
1712.	mhp4ooh7oo=>mhp7ooh4*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
1713.	mhp4ooh6oo=>mhp6ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1714.	mhp4ooh5oo=>mhp5ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1715.	mhp4ooh3oo=>mhp3ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1716.	mhp4ooh2oo=>mhp2ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1717.	mhp3ooh7oo=>mhp7ooh3*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
1718.	mhp3ooh6oo=>mhp6ooh3*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
1719.	mhp3ooh5oo=>mhp5ooh3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
1720.	mhp3ooh4oo=>mhp4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1721.	mhp3ooh2oo=>mhp2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
1722.	mhp2ooh6oo=>mhp6ooh2*o+oh	2.60E+05	1.0	14000
1723.	mhp2ooh5oo=>mhp5ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	15000
1724.	mhp2ooh4oo=>mhp4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
1725.	mhp2ooh3oo=>mhp3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
1726.	mhp2oohmoo=>mhpmooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
1727.	mhpmooh2oo=>mhp2oohm*o+oh	1.00E+08	1.0	28500
1728.	mhp6ooh7*o=>mhx6*o+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000
1729.	mhp5ooh7*o=>mpe5*o+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1730.	mhp5ooh7*o=>mb4j+choch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1731.	mhp4ooh7*o=>mb4*o+c2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1732.	mhp4ooh7*o=>mp3j+choc2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1733.	mhp3ooh7*o=>mp3*o+c3h6cho-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
1734.	mhp3ooh7*o=>me2j+choc3h6cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1735.	mhp7ooh6*o=>mhx6j*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
1736.	mhp5ooh6*o=>mpe5*o+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000
1737.	mhp4ooh6*o=>mb4*o+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
1738.	mhp4ooh6*o=>mp3j+c4ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1739.	mhp3ooh6*o=>mp3*o+acetoch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
1740.	mhp3ooh6*o=>me2j+c5ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1741.	mhp2ooh6*o=>ch3oco+c6ald5oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1742.	mhp7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
1743.	mhp6ooh5*o=>mpe5j*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1744.	mhp4ooh5*o=>mb4*o+c2h5co+oh	1.00E+16	0.0	43000
1745.	mhp3ooh5*o=>mp3*o+c2h5coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
1746.	mhp3ooh5*o=>me2j+c5ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1747.	mhp2ooh5*o=>ch3oco+c6ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1748.	mhp7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
1749.	mhp6ooh4*o=>mpe5j4*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1750.	mhp5ooh4*o=>mpe5*o4*o+c2h5+oh	1.00E+16	0.0	43000
1751.	mhp5ooh4*o=>mb4j*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1752.	mhp3ooh4*o=>mp3*o+nc3h7co+oh	1.00E+16	0.0	43000
1753.	mhp2ooh4*o=>ch3oco+c6ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
1754.	mhp7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
1755.	mhp6ooh3*o=>mpe5j3*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1756.	mhp5ooh3*o=>mb4j3*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1757.	mhp4ooh3*o=>mp3j*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1758.	mhp2ooh3*o=>ch3oco+c4h9cocho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1759.	mhp6ooh2*o=>mpe5j2*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1760.	mhp5ooh2*o=>mb4j2*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1761.	mhp4ooh2*o=>mp3j2*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1762.	mhp3ooh2*o=>me2j*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1763.	mhpmooh2*o=>hpaoj2*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
1764.	mhp2oohm*o=>chooco+c5h11cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
1765.	me2j+c5h915(+m)=mhp6d(+m)	4.90E+14	-0.5	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+0			
1766.	mhp6d=mp3j+c4h7-4	1.58E+17	0.0	87040
1767.	mhp6d=mb4j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
1768.	c2h3+mpe5j=mhp6d	2.05E+13	0.0	0
1769.	mhp6d5j+h=mhp6d	1.00E+13	0.0	0
1770.	mhp6d2j+h=mhp6d	1.00E+13	0.0	0
1771.	mhp5d4j+h=mhp5d	1.00E+13	0.0	0
1772.	mhp5d2j+h=mhp5d	1.00E+13	0.0	0
1773.	mhp4d3j+h=mhp4d	1.00E+13	0.0	0
1774.	mhp3d2j+h=mhp3d	1.00E+13	0.0	0
1775.	mhp6d+o=mhp6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1776.	mhp6d+o=mhp6d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1777.	mhp6d+h=mhp6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1778.	mhp6d+h=mhp6d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1779.	mhp6d+oh=mhp6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1780.	mhp6d+oh=mhp6d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1781.	mhp6d+ho2=mhp6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1782.	mhp6d+ho2=mhp6d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1783.	mhp6d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1784.	mhp6d+ch3o=mhp6d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1785.	mhp6d+o2=mhp6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1786.	mhp6d+o2=mhp6d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1787.	mhp5d+o=mhp6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1788.	mhp5d+o=mhp5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1789.	mhp5d+o=mhp5d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1790.	mhp5d+h=mhp6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1791.	mhp5d+h=mhp5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1792.	mhp5d+h=mhp5d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1793.	mhp5d+oh=mhp6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1794.	mhp5d+oh=mhp5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1795.	mhp5d+oh=mhp5d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1796.	mhp5d+ho2=mhp6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1797.	mhp5d+ho2=mhp5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1798.	mhp5d+ho2=mhp5d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1799.	mhp5d+ch3o=mhp6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1800.	mhp5d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1801.	mhp5d+ch3o=mhp5d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1802.	mhp5d+o2=mhp5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1803.	mhp5d+o2=mhp5d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1804.	mhp4d+o=mhp5d4j+oh	1.74E+11	0.7	5900
1805.	mhp4d+o=mhp4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1806.	mhp4d+o=mhp4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1807.	mhp4d+h=mhp5d4j+h2	1.74E+05	2.5	2510
1808.	mhp4d+h=mhp4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1809.	mhp4d+h=mhp4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1810.	mhp4d+oh=mhp5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
1811.	mhp4d+oh=mhp4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1812.	mhp4d+oh=mhp4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1813.	mhp4d+ho2=mhp5d4j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
1814.	mhp4d+ho2=mhp4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1815.	mhp4d+ho2=mhp4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1816.	mhp4d+ch3o=mhp5d4j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
1817.	mhp4d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1818.	mhp4d+ch3o=mhp4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1819.	mhp4d+o2=mhp5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1820.	mhp4d+o2=mhp4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1821.	mhp4d+o2=mhp4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1822.	mhp3d+o=mhp4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1823.	mhp3d+o=mhp3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1824.	mhp3d+h=mhp4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1825.	mhp3d+h=mhp3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1826.	mhp3d+oh=mhp4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1827.	mhp3d+oh=mhp3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1828.	mhp3d+ho2=mhp4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1829.	mhp3d+ho2=mhp3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1830.	mhp3d+ch3o=mhp4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1831.	mhp3d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1832.	mhp3d+o2=mhp4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1833.	mhp3d+o2=mhp3d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1834.	mhp2d+o=mhp3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1835.	mhp2d+h=mhp3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1836.	mhp2d+oh=mhp3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1837.	mhp2d+ho2=mhp3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1838.	mhp2d+ch3o=mhp3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
1839.	mhp2d+o2=mhp3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
1840.	mhp6d+o=mhx6j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
1841.	mhp5d+o=mpe5j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
1842.	mhp4d+o=mb4j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
1843.	mhp3d+o=mp3j+nc3h7co	1.00E+11	0.0	-1050
1844.	mhp2d+o=me2j+nc4h9co	1.00E+11	0.0	-1050
1845.	mhp6d5j=mp3j+c4h6	1.30E+13	0.0	35900
1846.	mhp6d2j=mp2d+c4h7-4	1.30E+13	0.0	33900
1847.	c6h10co+ch3o=mhp6d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1848.	mhp5d4j=c5h813+me2j	1.30E+13	0.0	35900
1849.	mhp5d2j=c4h7-3+mp2d	1.30E+13	0.0	30900
1850.	c6h10co+ch3o=mhp5d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1851.	mhp4d3j=c6h1013+ch3oco	1.30E+13	0.0	33900
1852.	mhp4d2j=mp2d+c4h7-4	1.30E+13	0.0	50000
1853.	c6h10co+ch3o=mhp4d2j	5.00E+11	0.0	-1000

1854.	mhp3d2j=mpe4d2d+c2h5	2.00E+13	0.0	15000
1855.	c6h10co+ch3o=mhp3d2j	5.00E+11	0.0	-1000
1856.	mhp6d4d+oh=h2o+nc4h5+mp2d	2.00E+13	0.0	0
1857.	mhp6d4d+h=h2+nc4h5+mp2d	2.00E+13	0.0	0
1858.	hco+mhx6j=mhp7*o	1.00E+13	0.0	0
1859.	mhp7*o+o2=mhp7j*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
1860.	mhp7*o+h=mhp7j*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
1861.	mhp7*o+oh=mhp7j*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
1862.	mhp7*o+o=mhp7j*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
1863.	mhp7*o+ho2=mhp7j*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
1864.	mhp7j*o=mhx6j+co	1.83E+15	-0.7	12910
1865.	mhp7j6*o=>ch2co+mpe5j	1.00E+13	0.0	28000
1866.	mhp7j6*o+o2=mhp7oo6*o	9.00E+18	-2.5	0
1867.	mhp7oo6*o+ho2=mhp7ooh6*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1868.	mhp7ooh6*o=mhp7o6*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1869.	mhp7oo6*o+ch3o2=>mhp7o5*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1870.	ch2o+mhx6j*o=mhp7o6*o	1.50E+11	0.0	11900
1871.	c2h4+mpe5j*o=mhp7j5*o	2.11E+11	0.0	7350
1872.	mhp7j5*o+o2=mhp7oo5*o	9.00E+18	-2.5	0
1873.	mhp7oo5*o+ho2=mhp7ooh5*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1874.	mhp7ooh5*o=mhp7o5*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1875.	mhp7oo5*o+ch3o2=>mhp7o5*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1876.	ch2o+mhx6j5*o=mhp7o5*o	1.50E+11	0.0	11900
1877.	mhp7j4*o=c2h4+mpe5j4*o	2.00E+13	0.0	28700
1878.	mhp7j4*o+o2=mhp7oo4*o	9.00E+18	-2.5	0
1879.	mhp7oo4*o+ho2=mhp7ooh4*o+o2	2.29E+11	0.0	-1790
1880.	mhp7ooh4*o=mhp7o4*o+oh	1.50E+16	0.0	42500
1881.	mhp7oo4*o+ch3o2=>mhp7o4*o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
1882.	ch2o+mhx6j4*o=mhp7o4*o	1.50E+11	0.0	11900
1883.	mo=mo8j+h	7.90E+15	0.0	97970
1884.	mo=mo7j+h	5.00E+15	0.0	94990
1885.	mo=mo6j+h	5.00E+15	0.0	94990
1886.	mo=mo5j+h	5.00E+15	0.0	94990
1887.	mo=mo4j+h	5.00E+15	0.0	94990
1888.	mo=mo3j+h	5.00E+15	0.0	94990
1889.	mo2j+h=mo	1.00E+14	0.0	0
1890.	mo=momj+h	7.90E+15	0.0	97970
1891.	mo=mhp7j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
1892.	mo=mhx6j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
1893.	mo=mpe5j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
1894.	mo=mb4j+pc4h9	1.58E+17	0.0	87040
1895.	mo=mp3j+c5h11-1	1.58E+17	0.0	87040
1896.	mo=me2j+c6h13-1	1.58E+17	0.0	87040
1897.	mo=ch3oco+c7h15-1	1.13E+16	0.0	81700
1898.	c7h15co+ch3o=mo	1.50E+13	0.0	0
1899.	mo=oaoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
1900.	mo=>c7h14co+ch3oh	3.80E+11	0.0	57500
1901.	mo+o2=mo8j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
1902.	mo+o2=mo7j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1903.	mo+o2=mo6j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1904.	mo+o2=mo5j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1905.	mo+o2=mo4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1906.	mo+o2=mo3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
1907.	mo+o2=mo2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
1908.	mo+o2=momj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
1909.	co2+c7h15-1=oaoj	1.00E+11	0.0	39360
1910.	mo+h=mo8j+h2	9.40E+04	2.8	6280
1911.	mo+h=mo7j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1912.	mo+h=mo6j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1913.	mo+h=mo5j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1914.	mo+h=mo4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1915.	mo+h=mo3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
1916.	mo+h=mo2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
1917.	mo+h=momj+h2	1.44E+13	0.0	6095
1918.	mo+o=mo8j+oh	9.65E+04	2.7	3716
1919.	mo+o=mo7j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1920.	mo+o=mo6j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1921.	mo+o=mo5j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1922.	mo+o=mo4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1923.	mo+o=mo3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
1924.	mo+o=mo2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
1925.	mo+o=momj+oh	9.65E+04	2.7	3716
1926.	mo+oh=mo8j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
1927.	mo+oh=mo7j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1928.	mo+oh=mo6j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1929.	mo+oh=mo5j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1930.	mo+oh=mo4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1931.	mo+oh=mo3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
1932.	mo+oh=mo2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
1933.	mo+oh=momj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
1934.	mo+ho2=mo8j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
1935.	mo+ho2=mo7j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1936.	mo+ho2=mo6j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1937.	mo+ho2=mo5j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1938.	mo+ho2=mo4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1939.	mo+ho2=mo3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
1940.	mo+ho2=mo2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
1941.	mo+ho2=momj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
1942.	mo+hco=mo8j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
1943.	mo+hco=mo7j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1944.	mo+hco=mo6j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1945.	mo+hco=mo5j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1946.	mo+hco=mo4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1947.	mo+hco=mo3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
1948.	mo+hco=mo2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
1949.	mo+hco=momj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
1950.	mo+ch3=mo8j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
1951.	mo+ch3=mo7j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1952.	mo+ch3=mo6j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1953.	mo+ch3=mo5j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1954.	mo+ch3=mo4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1955.	mo+ch3=mo3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
1956.	mo+ch3=mo2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
1957.	mo+ch3=momj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
1958.	mo+ch3o=mo8j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1959.	mo+ch3o=mo7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1960.	mo+ch3o=mo6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1961.	mo+ch3o=mo5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1962.	mo+ch3o=mo4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1963.	mo+ch3o=mo3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1964.	mo+ch3o=mo2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
1965.	mo+ch3o=momj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1966.	mo+ch2oh=mo8j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1967.	mo+ch2oh=mo7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1968.	mo+ch2oh=mo6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1969.	mo+ch2oh=mo5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1970.	mo+ch2oh=mo4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1971.	mo+ch2oh=mo3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
1972.	mo+ch2oh=mo2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
1973.	mo+ch2oh=momj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
1974.	mo+ch3o2=mo8j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
1975.	mo+ch3o2=mo7j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1976.	mo+ch3o2=mo6j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1977.	mo+ch3o2=mo5j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1978.	mo+ch3o2=mo4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1979.	mo+ch3o2=mo3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
1980.	mo+ch3o2=mo2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
1981.	mo+ch3o2=momj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
1982.	mo+c2h3=mo8j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
1983.	mo+c2h3=mo7j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1984.	mo+c2h3=mo6j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1985.	mo+c2h3=mo5j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1986.	mo+c2h3=mo4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1987.	mo+c2h3=mo3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
1988.	mo+c2h3=mo2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
1989.	mo+c2h3=momj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
1990.	mo+c2h5=mo8j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
1991.	mo+c2h5=mo7j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1992.	mo+c2h5=mo6j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1993.	mo+c2h5=mo5j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1994.	mo+c2h5=mo4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1995.	mo+c2h5=mo3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
1996.	mo+c2h5=mo2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
1997.	mo+c2h5=momj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
1998.	mo+c3h5-a=mo8j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
1999.	mo+c3h5-a=mo7j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2000.	mo+c3h5-a=mo6j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2001.	mo+c3h5-a=mo5j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2002.	mo+c3h5-a=mo4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2003.	mo+c3h5-a=mo3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2004.	mo+c3h5-a=mo2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
2005.	mo+c3h5-a=momj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
2006.	mo+mo2j=mo8j+mo	1.20E+02	3.3	19840
2007.	mo+mo2j=mo7j+mo	8.00E+01	3.3	18170
2008.	mo+mo2j=mo6j+mo	8.00E+01	3.3	18170
2009.	mo+mo2j=mo5j+mo	8.00E+01	3.3	18170
2010.	mo+mo2j=mo4j+mo	8.00E+01	3.3	18170
2011.	mo+mo2j=mo3j+mo	8.00E+01	3.3	18170
2012.	mo+mo2j=momj+mo	1.20E+02	3.3	19840
2013.	mo+mo8oo=mo8j+mo8ooh	2.80E+12	0.0	20440
2014.	mo+mo8oo=mo7j+mo8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2015.	mo+mo8oo=mo6j+mo8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2016.	mo+mo8oo=mo5j+mo8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2017.	mo+mo8oo=mo4j+mo8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2018.	mo+mo8oo=mo3j+mo8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2019.	mo+mo8oo=mo2j+mo8ooh	1.00E+12	0.0	14550
2020.	mo+mo8oo=momj+mo8ooh	2.80E+12	0.0	20440
2021.	mo+mo7oo=mo8j+mo7ooh	2.80E+12	0.0	20440
2022.	mo+mo7oo=mo7j+mo7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2023.	mo+mo7oo=mo6j+mo7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2024.	mo+mo7oo=mo5j+mo7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2025.	mo+mo7oo=mo4j+mo7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2026.	mo+mo7oo=mo3j+mo7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2027.	mo+mo7oo=mo2j+mo7ooh	1.00E+12	0.0	14550
2028.	mo+mo7oo=momj+mo7ooh	2.80E+12	0.0	20440
2029.	mo+mo6oo=mo8j+mo6ooh	2.80E+12	0.0	20440
2030.	mo+mo6oo=mo7j+mo6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2031.	mo+mo6oo=mo6j+mo6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2032.	mo+mo6oo=mo5j+mo6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2033.	mo+mo6oo=mo4j+mo6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2034.	mo+mo6oo=mo3j+mo6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2035.	mo+mo6oo=mo2j+mo6ooh	1.00E+12	0.0	14550
2036.	mo+mo6oo=momj+mo6ooh	2.80E+12	0.0	20440
2037.	mo+mo5oo=mo8j+mo5ooh	2.80E+12	0.0	20440
2038.	mo+mo5oo=mo7j+mo5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2039.	mo+mo5oo=mo6j+mo5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2040.	mo+mo5oo=mo5j+mo5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2041.	mo+mo5oo=mo4j+mo5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2042.	mo+mo5oo=mo3j+mo5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2043.	mo+mo5oo=mo2j+mo5ooh	1.00E+12	0.0	14550
2044.	mo+mo5oo=momj+mo5ooh	2.80E+12	0.0	20440
2045.	mo+mo4oo=mo8j+mo4ooh	2.80E+12	0.0	20440
2046.	mo+mo4oo=mo7j+mo4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2047.	mo+mo4oo=mo6j+mo4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2048.	mo+mo4oo=mo5j+mo4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2049.	mo+mo4oo=mo4j+mo4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2050.	mo+mo4oo=mo3j+mo4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2051.	mo+mo4oo=mo2j+mo4ooh	1.00E+12	0.0	14550
2052.	mo+mo4oo=momj+mo4ooh	2.80E+12	0.0	20440
2053.	mo+mo3oo=mo8j+mo3ooh	2.80E+12	0.0	20440
2054.	mo+mo3oo=mo7j+mo3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2055.	mo+mo3oo=mo6j+mo3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2056.	mo+mo3oo=mo5j+mo3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2057.	mo+mo3oo=mo4j+mo3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2058.	mo+mo3oo=mo3j+mo3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2059.	mo+mo3oo=mo2j+mo3ooh	1.00E+12	0.0	14550
2060.	mo+mo3oo=momj+mo3ooh	2.80E+12	0.0	20440
2061.	mo+mo2oo=mo8j+mo2ooh	2.80E+12	0.0	20440
2062.	mo+mo2oo=mo7j+mo2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2063.	mo+mo2oo=mo6j+mo2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2064.	mo+mo2oo=mo5j+mo2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2065.	mo+mo2oo=mo4j+mo2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2066.	mo+mo2oo=mo3j+mo2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2067.	mo+mo2oo=mo2j+mo2ooh	1.00E+12	0.0	14550
2068.	mo+mo2oo=momj+mo2ooh	2.80E+12	0.0	20440
2069.	mo+momoo=mo8j+momooh	2.80E+12	0.0	20440
2070.	mo+momoo=mo7j+momooh	1.87E+12	0.0	17690
2071.	mo+momoo=mo6j+momooh	1.87E+12	0.0	17690
2072.	mo+momoo=mo5j+momooh	1.87E+12	0.0	17690
2073.	mo+momoo=mo4j+momooh	1.87E+12	0.0	17690
2074.	mo+momoo=mo3j+momooh	1.87E+12	0.0	17690
2075.	mo+momoo=mo2j+momooh	1.00E+12	0.0	14550
2076.	mo+momoo=momj+momooh	2.80E+12	0.0	20440
2077.	mo8j=c2h4+mhx6j	2.00E+13	0.0	28700
2078.	mo7j=c3h6+mpe5j	2.00E+13	0.0	28700
2079.	mo6j=c4h8-1+mb4j	2.00E+13	0.0	28700
2080.	mo6j=ch3+mhp6d	2.00E+13	0.0	31000
2081.	mo5j=c5h10-1+mp3j	2.00E+13	0.0	28700
2082.	mo5j=c2h5+mhx5d	2.00E+13	0.0	28700
2083.	mo4j=c6h12-1+me2j	2.00E+13	0.0	25700
2084.	mo4j=nc3h7+mpe4d	2.00E+13	0.0	28700
2085.	mo3j=c7h14-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
2086.	mo3j=pc4h9+mb3d	2.00E+13	0.0	28700
2087.	mo2j=c5h11-1+mp2d	2.00E+13	0.0	28700
2088.	mo2j=c7h14co+ch3o	1.46E+12	0.6	53276
2089.	momj=ch2o+c7h15co	1.64E+22	-2.3	31950
2090.	mo8j=h+mo7d	3.00E+13	0.0	38000
2091.	mo7j=h+mo7d	3.00E+13	0.0	39000
2092.	mo7j=h+mo6d	3.00E+13	0.0	38000
2093.	mo6j=h+mo6d	3.00E+13	0.0	38000
2094.	mo6j=h+mo5d	3.00E+13	0.0	38000
2095.	mo5j=h+mo5d	3.00E+13	0.0	38000
2096.	mo5j=h+mo4d	3.00E+13	0.0	38000
2097.	mo4j=h+mo4d	3.00E+13	0.0	38000
2098.	mo4j=h+mo3d	3.00E+13	0.0	38000
2099.	mo3j=h+mo3d	3.00E+13	0.0	38000
2100.	mo3j=h+mo2d	3.00E+13	0.0	38000
2101.	mo2j=h+mo2d	3.00E+13	0.0	50500
2102.	mo8j=mo5j	9.90E+07	1.0	17300
2103.	mo8j=mo4j	1.70E+07	1.0	12000
2104.	mo8j=mo3j	2.90E+06	1.0	17400
2105.	mo7j=>mo4j	9.90E+07	1.0	17300
2106.	mo7j=>mo3j	1.70E+07	1.0	12000
2107.	mo6j=>mo3j	9.90E+07	1.0	17300
2108.	mo4j=>mo7j	9.90E+07	1.0	17300
2109.	mo4j=momj	4.35E+06	1.0	24900
2110.	mo3j=>mo7j	1.70E+07	1.0	12000
2111.	mo3j=>mo6j	9.90E+07	1.0	17300
2112.	mo3j=momj	2.50E+07	1.0	19500
2113.	mo2j=mo7j	2.90E+06	1.0	17400
2114.	mo2j=mo6j	1.70E+07	1.0	12000
2115.	mo2j=mo5j	9.90E+07	1.0	17300
2116.	mo2j=momj	1.50E+08	1.0	24800
2117.	mo8oo=mo8ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
2118.	mo8oo=mo8ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
2119.	mo8oo=mo8ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
2120.	mo8oo=mo8ooh4j	5.16E+05	1.0	21000
2121.	mo7oo=mo7ooh8j	1.50E+08	1.0	35500
2122.	mo7oo=mo7ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
2123.	mo7oo=mo7ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
2124.	mo7oo=mo7ooh4j	2.90E+06	1.0	22000
2125.	mo7oo=mo7ooh3j	5.16E+05	1.0	21000
2126.	mo6oo=mo6ooh8j	2.50E+07	1.0	28000
2127.	mo6oo=mo6ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
2128.	mo6oo=mo6ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
2129.	mo6oo=mo6ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
2130.	mo6oo=mo6ooh3j	2.90E+06	1.0	22000
2131.	mo6oo=mo6ooh2j	5.16E+05	1.0	18000
2132.	mo5oo=mo5ooh8j	4.35E+06	1.0	25000
2133.	mo5oo=mo5ooh7j	1.70E+07	1.0	25000
2134.	mo5oo=mo5ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
2135.	mo5oo=mo5ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
2136.	mo5oo=mo5ooh3j	1.70E+07	1.0	25000
2137.	mo5oo=mo5ooh2j	2.90E+06	1.0	19000
2138.	mo4oo=mo4ooh8j	7.74E+05	1.0	24000
2139.	mo4oo=mo4ooh7j	2.90E+06	1.0	22000
2140.	mo4oo=mo4ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
2141.	mo4oo=mo4ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
2142.	mo4oo=mo4ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
2143.	mo4oo=mo4ooh2j	1.70E+07	1.0	20000
2144.	mo3oo=mo3ooh7j	5.16E+05	1.0	21000
2145.	mo3oo=mo3ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
2146.	mo3oo=mo3ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
2147.	mo3oo=mo3ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
2148.	mo3oo=mo3ooh2j	9.90E+07	1.0	29500
2149.	mo2oo=mo2ooh6j	5.16E+05	1.0	21000
2150.	mo2oo=mo2ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
2151.	mo2oo=mo2ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
2152.	mo2oo=mo2ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
2153.	mo2oo=mo2oohmj	4.35E+06	1.0	28500
2154.	momoo=momooh2j	2.90E+06	1.0	21700
2155.	mo8j+o2=mo7d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2156.	mo7j+o2=mo7d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
2157.	mo7j+o2=mo6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2158.	mo6j+o2=mo6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2159.	mo6j+o2=mo5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2160.	mo5j+o2=mo5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2161.	mo5j+o2=mo4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2162.	mo4j+o2=mo4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2163.	mo4j+o2=mo3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2164.	mo3j+o2=mo3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
2165.	mo3j+o2=mo2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500

2166.	mo2j+o2=mo2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
2167.	mo8j+o2=mo8oo	9.00E+18	-2.5	0
2168.	mo7j+o2=mo7oo	1.70E+19	-2.5	0
2169.	mo6j+o2=mo6oo	1.80E+19	-2.5	0
2170.	mo5j+o2=mo5oo	1.80E+19	-2.5	0
2171.	mo4j+o2=mo4oo	1.80E+19	-2.5	0
2172.	mo3j+o2=mo3oo	1.05E+19	-2.5	0
2173.	mo2j+o2=mo2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2174.	momj+o2=momoo	3.50E+11	0.0	-1700
2175.	mo8ooh7j+o2=mo8ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
2176.	mo8ooh6j+o2=mo8ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
2177.	mo8ooh5j+o2=mo8ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
2178.	mo8ooh4j+o2=mo8ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
2179.	mo7ooh8j+o2=mo7ooh8oo	1.50E+18	-2.5	0
2180.	mo7ooh6j+o2=mo7ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
2181.	mo7ooh5j+o2=mo7ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
2182.	mo7ooh4j+o2=mo7ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
2183.	mo7ooh3j+o2=mo7ooh3oo	1.80E+19	-2.5	0
2184.	mo6ooh8j+o2=mo6ooh8oo	9.00E+18	-2.5	0
2185.	mo6ooh5j+o2=mo6ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
2186.	mo6ooh7j+o2=mo6ooh7oo	9.50E+18	-2.5	0
2187.	mo6ooh4j+o2=mo6ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
2188.	mo6ooh3j+o2=mo6ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
2189.	mo6ooh2j+o2=mo6ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2190.	mo5ooh8j+o2=mo5ooh8oo	9.00E+18	-2.5	0
2191.	mo5ooh7j+o2=mo5ooh7oo	1.70E+19	-2.5	0
2192.	mo5ooh6j+o2=mo5ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
2193.	mo5ooh4j+o2=mo5ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
2194.	mo5ooh3j+o2=mo5ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
2195.	mo5ooh2j+o2=mo5ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2196.	mo4ooh8j+o2=mo4ooh8oo	9.00E+18	-2.5	0
2197.	mo4ooh7j+o2=mo4ooh7oo	1.05E+19	-2.5	0
2198.	mo4ooh6j+o2=mo4ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
2199.	mo4ooh5j+o2=mo4ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
2200.	mo4ooh3j+o2=mo4ooh3oo	3.00E+18	-2.5	0
2201.	mo4ooh2j+o2=mo4ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2202.	mo3ooh7j+o2=mo3ooh7oo	1.70E+19	-2.5	0
2203.	mo3ooh6j+o2=mo3ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
2204.	mo3ooh5j+o2=mo3ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
2205.	mo3ooh4j+o2=mo3ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
2206.	mo3ooh2j+o2=mo3ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2207.	mo2ooh6j+o2=mo2ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
2208.	mo2ooh5j+o2=mo2ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
2209.	mo2ooh4j+o2=mo2ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
2210.	mo2ooh3j+o2=mo2ooh3oo	1.00E+19	-2.5	0
2211.	mo2oohmj+o2=mo2oohmoo	3.50E+11	0.0	-1700
2212.	momooh2j+o2=momooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
2213.	mo8oo+mo8j=mo8o+mo8o	7.00E+12	0.0	-1000
2214.	mo8oo+mo7j=mo8o+mo7o	7.00E+12	0.0	-1000
2215.	mo8oo+mo6j=mo8o+mo6o	7.00E+12	0.0	-1000
2216.	mo8oo+mo5j=mo8o+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2217.	mo8oo+mo4j=mo8o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2218.	mo8oo+mo3j=mo8o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2219.	mo8oo+mo2j=mo8o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2220.	mo8oo+momj=mo8o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2221.	mo7oo+mo7j=mo7o+mo7o	7.00E+12	0.0	-1000
2222.	mo7oo+mo6j=mo7o+mo6o	7.00E+12	0.0	-1000
2223.	mo7oo+mo5j=mo7o+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2224.	mo7oo+mo4j=mo7o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2225.	mo7oo+mo3j=mo7o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2226.	mo7oo+mo2j=mo7o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2227.	mo7oo+momj=mo7o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2228.	mo6oo+mo6j=mo6o+mo6o	7.00E+12	0.0	-1000
2229.	mo6oo+mo5j=mo6o+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2230.	mo6oo+mo4j=mo6o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2231.	mo6oo+mo3j=mo6o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2232.	mo6oo+mo2j=mo6o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2233.	mo6oo+momj=mo6o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2234.	mo5oo+mo5j=mo5o+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2235.	mo5oo+mo4j=mo5o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2236.	mo5oo+mo3j=mo5o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2237.	mo5oo+mo2j=mo5o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2238.	mo5oo+momj=mo5o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2239.	mo4oo+mo4j=mo4o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2240.	mo4oo+mo3j=mo4o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2241.	mo4oo+mo2j=mo4o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2242.	mo4oo+momj=mo4o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2243.	mo3oo+mo3j=mo3o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2244.	mo3oo+mo2j=mo3o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2245.	mo3oo+momj=mo3o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2246.	mo2oo+mo2j=mo2o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2247.	mo2oo+momj=mo2o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2248.	momoo+momj=momo+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2249.	ho2+mo8j=oh+mo8o	7.00E+12	0.0	-1000
2250.	ho2+mo7j=oh+mo7o	7.00E+12	0.0	-1000
2251.	ho2+mo6j=oh+mo6o	7.00E+12	0.0	-1000
2252.	ho2+mo5j=oh+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2253.	ho2+mo4j=oh+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2254.	ho2+mo3j=oh+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2255.	ho2+mo2j=oh+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2256.	ho2+momj=oh+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2257.	mo8oo+ch3=mo8o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2258.	mo7oo+ch3=mo7o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2259.	mo6oo+ch3=mo6o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2260.	mo5oo+ch3=mo5o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2261.	mo4oo+ch3=mo4o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2262.	mo3oo+ch3=mo3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2263.	mo2oo+ch3=mo2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2264.	momoo+ch3=momo+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
2265.	ch3o2+mo8j=ch3o+mo8o	7.00E+12	0.0	-1000
2266.	ch3o2+mo7j=ch3o+mo7o	7.00E+12	0.0	-1000
2267.	ch3o2+mo6j=ch3o+mo6o	7.00E+12	0.0	-1000
2268.	ch3o2+mo5j=ch3o+mo5o	7.00E+12	0.0	-1000
2269.	ch3o2+mo4j=ch3o+mo4o	7.00E+12	0.0	-1000
2270.	ch3o2+mo3j=ch3o+mo3o	7.00E+12	0.0	-1000
2271.	ch3o2+mo2j=ch3o+mo2o	7.00E+12	0.0	-1000
2272.	ch3o2+momj=ch3o+momo	7.00E+12	0.0	-1000
2273.	mo8oo+ho2=mo8ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2274.	mo7oo+ho2=mo7ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2275.	mo6oo+ho2=mo6ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2276.	mo5oo+ho2=mo5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2277.	mo4oo+ho2=mo4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2278.	mo3oo+ho2=mo3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2279.	mo2oo+ho2=mo2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2280.	momoo+ho2=momooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
2281.	mo8oo+h2o2=>mo8ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2282.	mo8ooh+ho2=>mo8oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2283.	mo7oo+h2o2=>mo7ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2284.	mo7ooh+ho2=>mo7oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2285.	mo6oo+h2o2=>mo6ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2286.	mo6ooh+ho2=>mo6oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2287.	mo5oo+h2o2=>mo5ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2288.	mo5ooh+ho2=>mo5oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2289.	mo4oo+h2o2=>mo4ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2290.	mo4ooh+ho2=>mo4oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2291.	mo3oo+h2o2=>mo3ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2292.	mo3ooh+ho2=>mo3oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2293.	mo2oo+h2o2=>mo2ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2294.	mo2ooh+ho2=>mo2oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2295.	momoo+h2o2=>momooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
2296.	momooh+ho2=>momoo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
2297.	mo8oo+mo8oo=>mo8o+mo8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2298.	mo8oo+mo7oo=>mo8o+mo7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2299.	mo8oo+mo6oo=>mo8o+mo6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2300.	mo8oo+mo5oo=>mo8o+mo5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2301.	mo8oo+mo4oo=>mo8o+mo4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2302.	mo8oo+mo3oo=>mo8o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2303.	mo8oo+mo2oo=>mo8o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2304.	mo8oo+momoo=>mo8o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2305.	mo7oo+mo7oo=>mo7o+mo7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2306.	mo7oo+mo6oo=>mo7o+mo6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2307.	mo7oo+mo5oo=>mo7o+mo5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2308.	mo7oo+mo4oo=>mo7o+mo4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2309.	mo7oo+mo3oo=>mo7o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2310.	mo7oo+mo2oo=>mo7o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2311.	mo7oo+momoo=>mo7o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2312.	mo6oo+mo6oo=>mo6o+mo6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2313.	mo6oo+mo5oo=>mo6o+mo5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2314.	mo6oo+mo4oo=>mo6o+mo4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2315.	mo6oo+mo3oo=>mo6o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2316.	mo6oo+mo2oo=>mo6o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2317.	mo6oo+momoo=>mo6o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2318.	mo5oo+mo5oo=>mo5o+mo5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2319.	mo5oo+mo4oo=>mo5o+mo4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2320.	mo5oo+mo3oo=>mo5o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2321.	mo5oo+mo2oo=>mo5o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2322.	mo5oo+momoo=>mo5o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2323.	mo4oo+mo4oo=>mo4o+mo4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2324.	mo4oo+mo3oo=>mo4o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2325.	mo4oo+mo2oo=>mo4o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2326.	mo4oo+momoo=>mo4o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2327.	mo3oo+mo3oo=>mo3o+mo3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2328.	mo3oo+mo2oo=>mo3o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2329.	mo3oo+momoo=>mo3o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2330.	mo2oo+mo2oo=>mo2o+mo2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2331.	mo2oo+momoo=>mo2o+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2332.	momoo+momoo=>momo+momo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2333.	mo8oo+ch3o2=>mo8o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2334.	mo7oo+ch3o2=>mo7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2335.	mo6oo+ch3o2=>mo6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2336.	mo5oo+ch3o2=>mo5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2337.	mo4oo+ch3o2=>mo4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2338.	mo3oo+ch3o2=>mo3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2339.	mo2oo+ch3o2=>mo2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2340.	momoo+ch3o2=>momo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
2341.	mo8oo=mo8o+oh	1.50E+16	0.0	42500
2342.	mo7oo=mo7o+oh	9.45E+15	0.0	41600
2343.	mo6oo=mo6o+oh	9.45E+15	0.0	41600
2344.	mo5oo=mo5o+oh	9.45E+15	0.0	41600
2345.	mo4oo=mo4o+oh	9.45E+15	0.0	41600
2346.	mo3oo=mo3o+oh	9.45E+15	0.0	41600
2347.	mo2oo=mo2o+oh	5.95E+15	0.0	42540
2348.	momoo=momo+oh	1.50E+16	0.0	42500
2349.	ch2o+mhp7j=mo8o	1.50E+11	0.0	11900
2350.	ch3cho+mhx6j=mo7o	1.50E+11	0.0	11900
2351.	ch3+mhp7*o=mo7o	1.50E+11	0.0	11900
2352.	c2h5cho+mpe5j=mo6o	1.50E+11	0.0	11900
2353.	c2h5+mhx6*o=mo6o	1.50E+11	0.0	11900
2354.	nc3h7cho+mb4j=mo5o	1.50E+11	0.0	11900
2355.	nc3h7+mpe5*o=mo5o	1.50E+11	0.0	11900
2356.	nc4h9cho+mp3j=mo4o	1.50E+11	0.0	11900
2357.	pc4h9+mb4*o=mo4o	1.50E+11	0.0	11900
2358.	c5h11cho+me2j=mo3o	1.50E+11	0.0	11900
2359.	c5h11-1+mp3*o=mo3o	1.50E+11	0.0	11900
2360.	c6h13cho+ch3oco=mo2o	1.50E+11	0.0	11900
2361.	c6h13-1+me2*o=mo2o	1.50E+11	0.0	11900
2362.	ch2o+oaoj=momo	1.50E+11	0.0	11900
2363.	mo8*o+h=mo8o	6.63E+09	1.1	4226
2364.	mom*o+h=momo	6.63E+09	1.1	4226
2365.	mo8ooh6j=>mocy8o6+oh	2.04E+11	0.0	19500
2366.	mo8ooh5j=>mocy8o5+oh	3.63E+10	0.0	13000
2367.	mo8ooh7j=>mocy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
2368.	mo7ooh5j=>mocy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
2369.	mo7ooh4j=>mocy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
2370.	mo7ooh3j=>mocy7o3+oh	5.15E+06	0.0	1950
2371.	mo6ooh8j=>mocy8o6+oh	4.47E+11	0.0	21900
2372.	mo6ooh4j=>mocy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
2373.	mo6ooh3j=>mocy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
2374.	mo6ooh2j=>mocy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
2375.	mo5ooh8j=>mocy8o5+oh	5.13E+10	0.0	14800
2376.	mo5ooh7j=>mocy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
2377.	mo5ooh3j=>mocy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
2378.	mo5ooh2j=>mocy5o2+oh	2.57E+10	0.0	11500
2379.	mo4ooh8j=>mocy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
2380.	mo4ooh7j=>mocy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
2381.	mo4ooh6j=>mocy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
2382.	mo4ooh2j=>mocy4o2+oh	3.31E+11	0.0	17400
2383.	mo3ooh7j=>mocy7o3+oh	5.15E+06	0.0	1950
2384.	mo3ooh6j=>mocy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
2385.	mo3ooh5j=>mocy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
2386.	mo2ooh6j=>mocy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
2387.	mo2ooh5j=>mocy5o2+oh	3.63E+10	0.0	13000
2388.	mo2ooh4j=>mocy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
2389.	mo2oohmj=>mocy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
2390.	momooh2j=>mocy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
2391.	mocy8o6+h=>mhx6j*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
2392.	mocy8o6+h=>mhp6d+hco+h2	4.80E+08	1.5	2785
2393.	mocy8o5+h=>mhx6j5*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
2394.	mocy8o5+h=>mhx5d+ch2cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
2395.	mocy8o4+h=>mhx6j4*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
2396.	mocy8o4+h=>mpe4d+c2h4cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
2397.	mocy7o5+h=>mpe5j*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
2398.	mocy7o5+h=>mhx5d+ch3co+h2	2.40E+08	1.5	2005
2399.	mocy7o4+h=>mpe5j4*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
2400.	mocy7o4+h=>mpe4d+ch3coch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
2401.	mocy7o3+h=>mpe5j3*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
2402.	mocy7o3+h=>mb3d+acetoch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
2403.	mocy6o4+h=>mb4j*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
2404.	mocy6o4+h=>mpe4d+c2h5co+h2	2.40E+08	1.5	2005
2405.	mocy6o3+h=>mb4j3*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
2406.	mocy6o3+h=>mb3d+c2h5coch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
2407.	mocy6o2+h=>mp2d+etcoetp+h2	9.60E+08	1.5	2005
2408.	mocy5o3+h=>mp3j*o+c5h10-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
2409.	mocy5o3+h=>mb3d+nc3h7co+h2	2.40E+08	1.5	2005
2410.	mocy5o2+h=>mp2d+nc3h7coch2+h2	9.60E+08	1.5	2005
2411.	mocy4o2+h=>mp2d+nc4h9co+h2	9.60E+08	1.5	2005
2412.	mocy2om+h=>c7h14co+ocho+h2	4.80E+08	1.5	2785
2413.	mocy8o6+oh=>mhx6j*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2414.	mocy8o6+oh=>mhp6d+hco+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
2415.	mocy8o5+oh=>mhx6j5*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2416.	mocy8o5+oh=>mhx5d+ch2cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
2417.	mocy8o4+oh=>mhx6j4*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2418.	mocy8o4+oh=>mpe4d+c2h4cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
2419.	mocy7o5+oh=>mpe5j*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2420.	mocy7o5+oh=>mhx5d+ch3co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2421.	mocy7o4+oh=>mpe5j4*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2422.	mocy7o4+oh=>mpe4d+ch3coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2423.	mocy7o3+oh=>mpe5j3*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2424.	mocy7o3+oh=>mb3d+acetoch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2425.	mocy6o4+oh=>mb4j*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2426.	mocy6o4+oh=>mpe4d+c2h5co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2427.	mocy6o3+oh=>mb4j3*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2428.	mocy6o3+oh=>mb3d+c2h5coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2429.	mocy6o2+oh=>mp2d+etcoetp+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
2430.	mocy5o3+oh=>mp3j*o+c5h10-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2431.	mocy5o3+oh=>mb3d+nc3h7co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
2432.	mocy5o2+oh=>mp2d+nc3h7coch2+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
2433.	mocy4o2+oh=>mp2d+nc4h9co+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
2434.	mocy2om+oh=>c7h14co+ocho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
2435.	mocy8o6+ho2=>mhx6j*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2436.	mocy8o6+ho2=>mhp6d+hco+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
2437.	mocy8o5+ho2=>mhx6j5*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2438.	mocy8o5+ho2=>mhx5d+ch2cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
2439.	mocy8o4+ho2=>mhx6j4*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2440.	mocy8o4+ho2=>mpe4d+c2h4cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
2441.	mocy7o5+ho2=>mpe5j*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2442.	mocy7o5+ho2=>mhx5d+ch3co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2443.	mocy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2444.	mocy7o4+ho2=>mpe4d+ch3coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2445.	mocy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2446.	mocy7o3+ho2=>mb3d+acetoch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2447.	mocy6o4+ho2=>mb4j*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2448.	mocy6o4+ho2=>mpe4d+c2h5co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2449.	mocy6o3+ho2=>mb4j3*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2450.	mocy6o3+ho2=>mb3d+c2h5coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2451.	mocy6o2+ho2=>mp2d+etcoetp+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
2452.	mocy5o3+ho2=>mp3j*o+c5h10-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2453.	mocy5o3+ho2=>mb3d+nc3h7co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
2454.	mocy5o2+ho2=>mp2d+nc3h7coch2+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
2455.	mocy4o2+ho2=>mp2d+nc4h9co+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
2456.	mocy2om+ho2=>c7h14co+ocho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
2457.	mocy8o6+ch3o=>mhx6j*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2458.	mocy8o6+ch3o=>mhp6d+hco+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
2459.	mocy8o5+ch3o=>mhx6j5*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2460.	mocy8o5+ch3o=>mhx5d+ch2cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
2461.	mocy8o4+ch3o=>mhx6j4*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2462.	mocy8o4+ch3o=>mpe4d+c2h4cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
2463.	mocy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2464.	mocy7o5+ch3o=>mhx5d+ch3co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2465.	mocy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2466.	mocy7o4+ch3o=>mpe4d+ch3coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2467.	mocy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2468.	mocy7o3+ch3o=>mb3d+acetoch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2469.	mocy6o4+ch3o=>mb4j*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2470.	mocy6o4+ch3o=>mpe4d+c2h5co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2471.	mocy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2472.	mocy6o3+ch3o=>mb3d+c2h5coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2473.	mocy6o2+ch3o=>mp2d+etcoetp+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
2474.	mocy5o3+ch3o=>mp3j*o+c5h10-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2475.	mocy5o3+ch3o=>mb3d+nc3h7co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2476.	mocy5o2+ch3o=>mp2d+nc3h7coch2+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
2477.	mocy4o2+ch3o=>mp2d+nc4h9co+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000

2478.	mocy2om+ch3o=>c7h14co+ocho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
2479.	mocy8o6+ch3o2=>mhx6j*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2480.	mocy8o6+ch3o2=>mhp6d+hco+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
2481.	mocy8o5+ch3o2=>mhx6j5*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2482.	mocy8o5+ch3o2=>mhx5d+ch2cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
2483.	mocy8o4+ch3o2=>mhx6j4*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2484.	mocy8o4+ch3o2=>mpe4d+c2h4cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
2485.	mocy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2486.	mocy7o5+ch3o2=>mhx5d+ch3co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2487.	mocy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2488.	mocy7o4+ch3o2=>mpe4d+ch3coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2489.	mocy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2490.	mocy7o3+ch3o2=>mb3d+acetoch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2491.	mocy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2492.	mocy6o4+ch3o2=>mpe4d+c2h5co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2493.	mocy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2494.	mocy6o3+ch3o2=>mb3d+c2h5coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2495.	mocy6o2+ch3o2=>mp2d+etcoetp+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
2496.	mocy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c5h10-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2497.	mocy5o3+ch3o2=>mb3d+nc3h7co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
2498.	mocy5o2+ch3o2=>mp2d+nc3h7coch2+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
2499.	mocy4o2+ch3o2=>mp2d+nc4h9co+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
2500.	mocy2om+ch3o2=>c7h14co+ocho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
2501.	mo7d+ho2=mo8ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
2502.	mo7d+ho2=mo7ooh8j	1.50E+11	0.0	7800
2503.	mo6d+ho2=mo7ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
2504.	mo6d+ho2=mo6ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
2505.	mo5d+ho2=mo6ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
2506.	mo5d+ho2=mo5ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
2507.	mo4d+ho2=mo5ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
2508.	mo4d+ho2=mo4ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
2509.	mo3d+ho2=mo4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
2510.	mo3d+ho2=mo3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
2511.	mo2d+ho2=mo3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
2512.	mo2d+ho2=mo2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
2513.	mo8ooh6j=>mhp6d+ch2o+oh	2.00E+13	0.0	31000
2514.	mo8ooh5j=>mhx5d+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700
2515.	mo8ooh4j=>mpe4d+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700
2516.	mo7ooh5j=>mhx5d+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2517.	mo7ooh4j=>mpe4d+prooh2-1	2.00E+13	0.0	28700
2518.	mo7ooh3j=>mb3d+c2h4+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2519.	mo6ooh8j=>mhx6*o+c2h4+oh	2.00E+13	0.0	28700
2520.	mo6ooh4j=>mpe4d+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2521.	mo6ooh3j=>mb3d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
2522.	mo6ooh2j=>mp2d+c2h4+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2523.	mo5ooh8j=>mhx5ooh6j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
2524.	mo5ooh7j=>mpe5*o+c3h6+oh	2.00E+13	0.0	28700
2525.	mo5ooh3j=>mb3d+nc3h7cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2526.	mo5ooh2j=>mp2d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
2527.	mo4ooh8j=>mhx4ooh6j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
2528.	mo4ooh7j=>mpe4d+c3h6+ho2	2.00E+13	0.0	28700
2529.	mo4ooh6j=>mb4*o+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
2530.	mo4ooh2j=>mp2d+nc4h9cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2531.	mo3ooh7j=>mp3*o+oh+c2h4+c3h6	2.00E+13	0.0	28700
2532.	mo3ooh6j=>mb3ooh4j+c4h8-1	2.00E+13	0.0	28700
2533.	mo3ooh5j=>mp3*o+c5h10-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
2534.	mo2ooh6j=>mb2ooh4j+c4h8-1	2.00E+13	0.0	28700
2535.	mo2ooh5j=>mp2d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
2536.	mo2ooh4j=>me2*o+c6h12-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
2537.	mo2oohmj=>ch2o+co+c6h13cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
2538.	momooh2j=>ch2o+c7h14co+ho2	2.00E+13	0.0	28700
2539.	mo8ooh7oo=>mo7ooh8*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
2540.	mo8ooh6oo=>mo6ooh8*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
2541.	mo8ooh5oo=>mo5ooh8*o+oh	2.90E+06	1.0	20000
2542.	mo8ooh4oo=>mo4ooh8*o+oh	5.16E+05	1.0	19000
2543.	mo7ooh8oo=>mo8ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2544.	mo7ooh6oo=>mo6ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2545.	mo7ooh5oo=>mo5ooh7*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2546.	mo7ooh4oo=>mo4ooh7*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2547.	mo7ooh3oo=>mo3ooh7*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
2548.	mo6ooh8oo=>mo8ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2549.	mo6ooh7oo=>mo7ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2550.	mo6ooh5oo=>mo5ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2551.	mo6ooh4oo=>mo4ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2552.	mo6ooh3oo=>mo3ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2553.	mo6ooh2oo=>mo2ooh6*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
2554.	mo5ooh8oo=>mo8ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2555.	mo5ooh7oo=>mo7ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2556.	mo5ooh6oo=>mo6ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2557.	mo5ooh4oo=>mo4ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2558.	mo5ooh3oo=>mo3ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2559.	mo5ooh2oo=>mo2ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2560.	mo4ooh8oo=>mo8ooh4*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
2561.	mo4ooh7oo=>mo7ooh4*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2562.	mo4ooh6oo=>mo6ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2563.	mo4ooh5oo=>mo5ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2564.	mo4ooh3oo=>mo3ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2565.	mo4ooh2oo=>mo2ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2566.	mo3ooh7oo=>mo7ooh3*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
2567.	mo3ooh6oo=>mo6ooh3*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
2568.	mo3ooh5oo=>mo5ooh3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
2569.	mo3ooh4oo=>mo4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2570.	mo3ooh2oo=>mo2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
2571.	mo2ooh6oo=>mo6ooh2*o+oh	2.60E+05	1.0	14000
2572.	mo2ooh5oo=>mo5ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	15000
2573.	mo2ooh4oo=>mo4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
2574.	mo2ooh3oo=>mo3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
2575.	mo2oohmoo=>momooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
2576.	momooh2oo=>mo2oohm*o+oh	2.90E+06	1.0	28500
2577.	mo8ooh7oo=>mo7ooh8oo	7.27E+09	0.0	12700
2578.	mo7ooh8oo=>mo8ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700
2579.	mo7ooh6oo=>mo6ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700
2580.	mo6ooh7oo=>mo7ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
2581.	mo6ooh5oo=>mo5ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
2582.	mo5ooh6oo=>mo6ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
2583.	mo5ooh4oo=>mo4ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
2584.	mo4ooh5oo=>mo5ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
2585.	mo4ooh3oo=>mo3ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
2586.	mo3ooh4oo=>mo4ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
2587.	mo3ooh2oo=>mo2ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
2588.	mo2ooh3oo=>mo3ooh2oo	7.27E+09	0.0	12700
2589.	mo7ooh8*o=>mhp7*o+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000
2590.	mo6ooh8*o=>mhx6*o+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2591.	mo5ooh8*o=>mpe5*o+c2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2592.	mo5ooh8*o=>mb4j+choc2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2593.	mo4ooh8*o=>mb4*o+c3h6cho-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
2594.	mo4ooh8*o=>mp3j+choc3h6cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2595.	mo8ooh7*o=>mhp7j*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2596.	mo6ooh7*o=>mhx6*o+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000
2597.	mo5ooh7*o=>mpe5*o+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
2598.	mo5ooh7*o=>mb4j+c4ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2599.	mo4ooh7*o=>mb4*o+acetoch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
2600.	mo4ooh7*o=>mp3j+c5ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2601.	mo3ooh7*o=>me2j+c6ald5oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2602.	mo8ooh6*o=>mhp7j6*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2603.	mo7ooh6*o=>mhx6j*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2604.	mo5ooh6*o=>mpe5*o+c2h5co+oh	1.00E+16	0.0	43000
2605.	mo4ooh6*o=>mb4*o+c2h5coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
2606.	mo4ooh6*o=>mp3j+c5ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2607.	mo3ooh6*o=>mp3*o+etcoetp+oh	1.00E+16	0.0	43000
2608.	mo3ooh6*o=>me2j+c6ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2609.	mo2ooh6*o=>ch3oco+c7ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2610.	mo2ooh6*o=>me2*o+prcoet-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
2611.	mo8ooh5*o=>mhp7j5*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2612.	mo7ooh5*o=>mhx6j5*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2613.	mo6ooh5*o=>mpe5j*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2614.	mo4ooh5*o=>mb4*o+nc3h7co+oh	1.00E+16	0.0	43000
2615.	mo3ooh5*o=>mp3*o+nc3h7coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
2616.	mo3ooh5*o=>me2j+c6ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2617.	mo2ooh5*o=>ch3oco+c7ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2618.	mo2ooh5*o=>me2*o+nprcoetp+oh	1.00E+16	0.0	43000
2619.	mo8ooh4*o=>mhp7j4*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2620.	mo7ooh4*o=>mhx6j4*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2621.	mo6ooh4*o=>mpe5j4*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2622.	mo5ooh4*o=>mb4j*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2623.	mo3ooh4*o=>mp3*o+nc4h9co+oh	1.00E+16	0.0	43000
2624.	mo2ooh4*o=>ch3oco+c7ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
2625.	mo2ooh4*o=>nc4h9coch2+me2*o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2626.	mo7ooh3*o=>mhx6j3*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2627.	mo6ooh3*o=>mpe5j3*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2628.	mo5ooh3*o=>mb4j3*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2629.	mo4ooh3*o=>mp3j*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2630.	mo2ooh3*o=>ch3oco+c5h11cocho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2631.	mo6ooh2*o=>mpe5j2*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2632.	mo5ooh2*o=>mb4j2*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2633.	mo4ooh2*o=>mp3j2*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2634.	mo3ooh2*o=>me2j*o+c5h11cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2635.	momooh2*o=>oaoj2*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
2636.	mo2oohm*o=>chooco+c6h13cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
2637.	hco+mhp7j=mo8*o	1.00E+13	0.0	0
2638.	mo8*o+o2=mo8j*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
2639.	mo8*o+h=mo8j*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
2640.	mo8*o+oh=mo8j*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
2641.	mo8*o+o=mo8j*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
2642.	mo8*o+ho2=mo8j*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
2643.	mo8j*o=mhp7j+co	1.83E+15	-0.7	12910
2644.	mom*o+o2=momj*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
2645.	mom*o+h=momj*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
2646.	mom*o+oh=momj*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
2647.	mom*o+o=momj*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
2648.	mom*o+ho2=momj*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
2649.	momj*o=oaoj+co	1.83E+15	-0.7	12910
2650.	me2j+c6h1116(+m)=mo7d(+m)	4.90E+14	-0.5	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+0	
2651.	mo7d=mp3j+c5h915	1.58E+17	0.0	87040
2652.	mo7d=mb4j+c4h7-4	1.58E+17	0.0	87040
2653.	mo7d=mpe5j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
2654.	c2h3+mhx6j=mo7d	2.05E+13	0.0	0
2655.	mo7d6j+h=mo7d	1.00E+13	0.0	0
2656.	mo6d5j+h=mo6d	1.00E+13	0.0	0
2657.	mo5d4j+h=mo5d	1.00E+13	0.0	0
2658.	mo4d3j+h=mo4d	1.00E+13	0.0	0
2659.	mo3d2j+h=mo3d	1.00E+13	0.0	0
2660.	mo7d+o=mo7d6j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2661.	mo7d+o=mo7d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2662.	mo7d+h=mo7d6j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2663.	mo7d+h=mo7d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2664.	mo7d+oh=mo7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2665.	mo7d+oh=mo7d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2666.	mo7d+ho2=mo7d6j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2667.	mo7d+ho2=mo7d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2668.	mo7d+ch3o=mo7d6j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2669.	mo7d+ch3o=mo7d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2670.	mo7d+o2=mo7d6j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2671.	mo7d+o2=mo7d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
2672.	mo6d+o=mo7d6j+oh	1.74E+11	0.7	5900
2673.	mo6d+o=mo6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2674.	mo6d+o=mo6d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2675.	mo6d+h=mo7d6j+h2	1.74E+05	2.5	2510
2676.	mo6d+h=mo6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2677.	mo6d+h=mo6d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2678.	mo6d+oh=mo7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
2679.	mo6d+oh=mo6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2680.	mo6d+oh=mo6d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2681.	mo6d+ho2=mo7d6j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
2682.	mo6d+ho2=mo6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2683.	mo6d+ho2=mo6d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2684.	mo6d+ch3o=mo7d6j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
2685.	mo6d+ch3o=mo6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2686.	mo6d+ch3o=mo6d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2687.	mo6d+o2=mo6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2688.	mo6d+o2=mo7d6j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
2689.	mo6d+o2=mo6d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
2690.	mo5d+o=mo6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2691.	mo5d+o=mo5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2692.	mo5d+o=mo5d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2693.	mo5d+h=mo6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2694.	mo5d+h=mo5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2695.	mo5d+h=mo5d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2696.	mo5d+oh=mo6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2697.	mo5d+oh=mo5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2698.	mo5d+oh=mo5d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2699.	mo5d+ho2=mo6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2700.	mo5d+ho2=mo5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2701.	mo5d+ho2=mo5d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2702.	mo5d+ch3o=mo6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2703.	mo5d+ch3o=mo5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2704.	mo5d+ch3o=mo5d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2705.	mo5d+o2=mo6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2706.	mo5d+o2=mo5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2707.	mo5d+o2=mo5d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
2708.	mo4d+o=mo5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2709.	mo4d+o=mo4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2710.	mo4d+o=mo4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2711.	mo4d+h=mo5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2712.	mo4d+h=mo4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2713.	mo4d+h=mo4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2714.	mo4d+oh=mo5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2715.	mo4d+oh=mo4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2716.	mo4d+oh=mo4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2717.	mo4d+ho2=mo5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2718.	mo4d+ho2=mo4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2719.	mo4d+ho2=mo4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2720.	mo4d+ch3o=mo5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2721.	mo4d+ch3o=mo4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2722.	mo4d+ch3o=mo4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2723.	mo4d+o2=mo4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2724.	mo4d+o2=mo5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2725.	mo4d+o2=mo4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
2726.	mo3d+o=mo4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2727.	mo3d+o=mo3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2728.	mo3d+h=mo4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2729.	mo3d+h=mo3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2730.	mo3d+oh=mo4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2731.	mo3d+oh=mo3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2732.	mo3d+ho2=mo4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2733.	mo3d+ho2=mo3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2734.	mo3d+ch3o=mo4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2735.	mo3d+ch3o=mo3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2736.	mo3d+o2=mo4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2737.	mo3d+o2=mo3d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
2738.	mo2d+o=mo3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2739.	mo2d+h=mo3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2740.	mo2d+oh=mo3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2741.	mo2d+ho2=mo3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2742.	mo2d+ch3o=mo3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
2743.	mo2d+o2=mo3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
2744.	mo7d+o=mhp7j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
2745.	mo6d+o=mhx6j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
2746.	mo5d+o=mpe5j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
2747.	mo4d+o=mb4j+nc3h7co	1.00E+11	0.0	-1050
2748.	mo3d+o=mp3j+nc4h9co	1.00E+11	0.0	-1050
2749.	mo2d+o=me2j+c5h11co	1.00E+11	0.0	-1050
2750.	mo7d6j=c4h6+mb4j	1.30E+13	0.0	35900
2751.	mo7d2j=c5h915+mp2d	1.30E+13	0.0	33900
2752.	c7h12co+ch3o=mo7d2j	5.00E+11	0.0	-1000
2753.	mo6d5j=c5h813+mp3j	1.30E+13	0.0	35900
2754.	mo6d2j=c5h913+mp2d	1.30E+13	0.0	33900
2755.	c7h12co+ch3o=mo6d2j	5.00E+11	0.0	-1000
2756.	mo5d4j=c6h1013+me2j	1.30E+13	0.0	35900
2757.	mo5d4j=mhp6d4d+ch3	1.30E+13	0.0	38200
2758.	mo5d2j=c5h913+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
2759.	c7h12co+ch3o=mo5d2j	5.00E+11	0.0	-1000
2760.	mo4d3j=c7h12+ch3oco	1.30E+13	0.0	33900
2761.	mo4d3j=mhx5d3d+c2h5	1.30E+13	0.0	35900
2762.	mo4d2j=mp2d+c5h915	1.30E+13	0.0	50000
2763.	c7h12co+ch3o=mo4d2j	5.00E+11	0.0	-1000
2764.	c7h12co+ch3o=mo3d2j	5.00E+11	0.0	-1000
2765.	mo3d2j=mpe4d2d+nc3h7	1.30E+13	0.0	35900
2766.	c5h9co=c5h913+co	1.83E+15	-0.7	12910
2767.	mn=mn9j+h	7.90E+15	0.0	97970
2768.	mn=mn8j+h	5.00E+15	0.0	94990
2769.	mn=mn7j+h	5.00E+15	0.0	94990
2770.	mn=mn6j+h	5.00E+15	0.0	94990
2771.	mn=mn5j+h	5.00E+15	0.0	94990
2772.	mn=mn4j+h	5.00E+15	0.0	94990
2773.	mn=mn3j+h	5.00E+15	0.0	94990
2774.	mn2j+h=mn	1.00E+14	0.0	0
2775.	mn=mnmj+h	7.90E+15	0.0	97970
2776.	mn=mo8j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
2777.	mn=mhp7j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
2778.	mn=mhx6j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
2779.	mn=mpe5j+pc4h9	1.58E+17	0.0	87040
2780.	mn=mb4j+c5h11-1	1.58E+17	0.0	87040
2781.	mn=mp3j+c6h13-1	1.58E+17	0.0	87040
2782.	mn=me2j+c7h15-1	1.58E+17	0.0	87040
2783.	mn=ch3oco+c8h17-1	1.13E+16	0.0	81700
2784.	c8h17co+ch3o=mn	1.50E+13	0.0	0
2785.	mn=naoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
2786.	mn=>c8h16co+ch3oh	3.80E+11	0.0	57500
2787.	mn+o2=mn9j+ho2	2.00E+13	0.0	50870

2788.	mn+o2=mn8j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2789.	mn+o2=mn7j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2790.	mn+o2=mn6j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2791.	mn+o2=mn5j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2792.	mn+o2=mn4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2793.	mn+o2=mn3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
2794.	mn+o2=mn2j+ho2	2.00E+13	0.0	45200
2795.	mn+o2=mnmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
2796.	co2+c8h17-1=naoj	1.00E+11	0.0	39360
2797.	mn+h=mn9j+h2	9.40E+04	2.8	6280
2798.	mn+h=mn8j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2799.	mn+h=mn7j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2800.	mn+h=mn6j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2801.	mn+h=mn5j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2802.	mn+h=mn4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2803.	mn+h=mn3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
2804.	mn+h=mn2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
2805.	mn+h=mnmj+h2	1.44E+13	0.0	6095
2806.	mn+o=mn9j+oh	9.65E+04	2.7	3716
2807.	mn+o=mn8j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2808.	mn+o=mn7j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2809.	mn+o=mn6j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2810.	mn+o=mn5j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2811.	mn+o=mn4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2812.	mn+o=mn3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
2813.	mn+o=mn2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
2814.	mn+o=mnmj+oh	9.65E+04	2.7	3716
2815.	mn+oh=mn9j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
2816.	mn+oh=mn8j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2817.	mn+oh=mn7j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2818.	mn+oh=mn6j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2819.	mn+oh=mn5j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2820.	mn+oh=mn4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2821.	mn+oh=mn3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
2822.	mn+oh=mn2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
2823.	mn+oh=mnmj+h2o	7.10E+06	1.8	-596
2824.	mn+ho2=mn9j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
2825.	mn+ho2=mn8j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2826.	mn+ho2=mn7j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2827.	mn+ho2=mn6j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2828.	mn+ho2=mn5j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2829.	mn+ho2=mn4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2830.	mn+ho2=mn3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
2831.	mn+ho2=mn2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
2832.	mn+ho2=mnmj+h2o2	9.64E+10	0.0	12580
2833.	mn+hco=mn9j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
2834.	mn+hco=mn8j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2835.	mn+hco=mn7j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2836.	mn+hco=mn6j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2837.	mn+hco=mn5j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2838.	mn+hco=mn4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2839.	mn+hco=mn3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
2840.	mn+hco=mn2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
2841.	mn+hco=mnmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
2842.	mn+ch3=mn9j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
2843.	mn+ch3=mn8j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2844.	mn+ch3=mn7j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2845.	mn+ch3=mn6j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2846.	mn+ch3=mn5j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2847.	mn+ch3=mn4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2848.	mn+ch3=mn3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
2849.	mn+ch3=mn2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
2850.	mn+ch3=mnmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
2851.	mn+ch3o=mn9j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
2852.	mn+ch3o=mn8j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2853.	mn+ch3o=mn7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2854.	mn+ch3o=mn6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2855.	mn+ch3o=mn5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2856.	mn+ch3o=mn4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2857.	mn+ch3o=mn3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2858.	mn+ch3o=mn2j+ch3oh	1.78E+12	0.0	1200
2859.	mn+ch3o=mnmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
2860.	mn+ch2oh=mn9j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
2861.	mn+ch2oh=mn8j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2862.	mn+ch2oh=mn7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2863.	mn+ch2oh=mn6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2864.	mn+ch2oh=mn5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2865.	mn+ch2oh=mn4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2866.	mn+ch2oh=mn3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
2867.	mn+ch2oh=mn2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
2868.	mn+ch2oh=mnmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
2869.	mn+ch3o2=mn9j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
2870.	mn+ch3o2=mn8j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2871.	mn+ch3o2=mn7j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2872.	mn+ch3o2=mn6j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2873.	mn+ch3o2=mn5j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2874.	mn+ch3o2=mn4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2875.	mn+ch3o2=mn3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
2876.	mn+ch3o2=mn2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
2877.	mn+ch3o2=mnmj+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
2878.	mn+c2h3=mn9j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
2879.	mn+c2h3=mn8j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2880.	mn+c2h3=mn7j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2881.	mn+c2h3=mn6j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2882.	mn+c2h3=mn5j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2883.	mn+c2h3=mn4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2884.	mn+c2h3=mn3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
2885.	mn+c2h3=mn2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
2886.	mn+c2h3=mnmj+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
2887.	mn+c2h5=mn9j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
2888.	mn+c2h5=mn8j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2889.	mn+c2h5=mn7j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2890.	mn+c2h5=mn6j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2891.	mn+c2h5=mn5j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2892.	mn+c2h5=mn4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2893.	mn+c2h5=mn3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
2894.	mn+c2h5=mn2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
2895.	mn+c2h5=mnmj+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
2896.	mn+c3h5-a=mn9j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
2897.	mn+c3h5-a=mn8j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2898.	mn+c3h5-a=mn7j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2899.	mn+c3h5-a=mn6j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2900.	mn+c3h5-a=mn5j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2901.	mn+c3h5-a=mn4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2902.	mn+c3h5-a=mn3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
2903.	mn+c3h5-a=mn2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
2904.	mn+c3h5-a=mnmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
2905.	mn+mn2j=mn9j+mn	1.20E+02	3.3	19840
2906.	mn+mn2j=mn8j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2907.	mn+mn2j=mn7j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2908.	mn+mn2j=mn6j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2909.	mn+mn2j=mn5j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2910.	mn+mn2j=mn4j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2911.	mn+mn2j=mn3j+mn	8.00E+01	3.3	18170
2912.	mn+mn2j=mnmj+mn	1.20E+02	3.3	19840
2913.	mn+mn9oo=mn9j+mn9ooh	2.80E+12	0.0	20440
2914.	mn+mn9oo=mn8j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2915.	mn+mn9oo=mn7j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2916.	mn+mn9oo=mn6j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2917.	mn+mn9oo=mn5j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2918.	mn+mn9oo=mn4j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2919.	mn+mn9oo=mn3j+mn9ooh	1.87E+12	0.0	17690
2920.	mn+mn9oo=mn2j+mn9ooh	1.00E+12	0.0	14550
2921.	mn+mn9oo=mnmj+mn9ooh	2.80E+12	0.0	20440
2922.	mn+mn8oo=mn9j+mn9ooh	2.80E+12	0.0	20440
2923.	mn+mn8oo=mn8j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2924.	mn+mn8oo=mn7j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2925.	mn+mn8oo=mn6j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2926.	mn+mn8oo=mn5j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2927.	mn+mn8oo=mn4j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2928.	mn+mn8oo=mn3j+mn8ooh	1.87E+12	0.0	17690
2929.	mn+mn8oo=mn2j+mn8ooh	1.00E+12	0.0	14550
2930.	mn+mn8oo=mnmj+mn8ooh	2.80E+12	0.0	20440
2931.	mn+mn7oo=mn9j+mn7ooh	2.80E+12	0.0	20440
2932.	mn+mn7oo=mn8j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2933.	mn+mn7oo=mn7j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2934.	mn+mn7oo=mn6j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2935.	mn+mn7oo=mn5j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2936.	mn+mn7oo=mn4j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2937.	mn+mn7oo=mn3j+mn7ooh	1.87E+12	0.0	17690
2938.	mn+mn7oo=mn2j+mn7ooh	1.00E+12	0.0	14550
2939.	mn+mn7oo=mnmj+mn7ooh	2.80E+12	0.0	20440
2940.	mn+mn6oo=mn9j+mn6ooh	2.80E+12	0.0	20440
2941.	mn+mn6oo=mn8j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2942.	mn+mn6oo=mn7j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2943.	mn+mn6oo=mn6j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2944.	mn+mn6oo=mn5j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2945.	mn+mn6oo=mn4j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2946.	mn+mn6oo=mn3j+mn6ooh	1.87E+12	0.0	17690
2947.	mn+mn6oo=mn2j+mn6ooh	1.00E+12	0.0	14550
2948.	mn+mn6oo=mnmj+mn6ooh	2.80E+12	0.0	20440
2949.	mn+mn5oo=mn9j+mn5ooh	2.80E+12	0.0	20440
2950.	mn+mn5oo=mn8j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2951.	mn+mn5oo=mn7j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2952.	mn+mn5oo=mn6j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2953.	mn+mn5oo=mn5j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2954.	mn+mn5oo=mn4j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2955.	mn+mn5oo=mn3j+mn5ooh	1.87E+12	0.0	17690
2956.	mn+mn5oo=mn2j+mn5ooh	1.00E+12	0.0	14550
2957.	mn+mn5oo=mnmj+mn5ooh	2.80E+12	0.0	20440
2958.	mn+mn4oo=mn9j+mn4ooh	2.80E+12	0.0	20440
2959.	mn+mn4oo=mn8j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2960.	mn+mn4oo=mn7j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2961.	mn+mn4oo=mn6j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2962.	mn+mn4oo=mn5j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2963.	mn+mn4oo=mn4j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2964.	mn+mn4oo=mn3j+mn4ooh	1.87E+12	0.0	17690
2965.	mn+mn4oo=mn2j+mn4ooh	1.00E+12	0.0	14550
2966.	mn+mn4oo=mnmj+mn4ooh	2.80E+12	0.0	20440
2967.	mn+mn3oo=mn9j+mn3ooh	2.80E+12	0.0	20440
2968.	mn+mn3oo=mn8j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2969.	mn+mn3oo=mn7j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2970.	mn+mn3oo=mn6j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2971.	mn+mn3oo=mn5j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2972.	mn+mn3oo=mn4j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2973.	mn+mn3oo=mn3j+mn3ooh	1.87E+12	0.0	17690
2974.	mn+mn3oo=mn2j+mn3ooh	1.00E+12	0.0	14550
2975.	mn+mn3oo=mnmj+mn3ooh	2.80E+12	0.0	20440
2976.	mn+mn2oo=mn9j+mn2ooh	2.80E+12	0.0	20440
2977.	mn+mn2oo=mn8j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2978.	mn+mn2oo=mn7j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2979.	mn+mn2oo=mn6j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2980.	mn+mn2oo=mn5j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2981.	mn+mn2oo=mn4j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2982.	mn+mn2oo=mn3j+mn2ooh	1.87E+12	0.0	17690
2983.	mn+mn2oo=mn2j+mn2ooh	1.00E+12	0.0	14550
2984.	mn+mn2oo=mnmj+mn2ooh	2.80E+12	0.0	20440
2985.	mn+mnmoo=mn9j+mnmooh	2.80E+12	0.0	20440
2986.	mn+mnmoo=mn8j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2987.	mn+mnmoo=mn7j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2988.	mn+mnmoo=mn6j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2989.	mn+mnmoo=mn5j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2990.	mn+mnmoo=mn4j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2991.	mn+mnmoo=mn3j+mnmooh	1.87E+12	0.0	17690
2992.	mn+mnmoo=mn2j+mnmooh	1.00E+12	0.0	14550
2993.	mn+mnmoo=mnmj+mnmooh	2.80E+12	0.0	20440
2994.	mn9j=c2h4+mhp7j	2.00E+13	0.0	28700
2995.	mn8j=c3h6+mhx6j	2.00E+13	0.0	28700
2996.	mn7j=c4h8-1+mpe5j	2.00E+13	0.0	28700
2997.	mn7j=ch3+mo7d	2.00E+13	0.0	31000
2998.	mn6j=c5h10-1+mb4j	2.00E+13	0.0	28700
2999.	mn6j=c2h5+mhp6d	2.00E+13	0.0	28700
3000.	mn5j=c6h12-1+mp3j	2.00E+13	0.0	24700
3001.	mn5j=nc3h7+mhx5d	2.00E+13	0.0	28700
3002.	mn4j=pc4h9+mpe4d	2.00E+13	0.0	28700
3003.	mn4j=c7h14-1+me2j	2.00E+13	0.0	28700
3004.	mn3j=c8h16-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
3005.	mn3j=c5h11-1+mb3d	2.00E+13	0.0	28700
3006.	mn2j=c6h13-1+mp2d	2.00E+13	0.0	28700
3007.	mn2j=c8h16co+ch3o	1.46E+12	0.6	53276
3008.	mnmj=ch2o+c8h17co	1.64E+22	-2.3	31950
3009.	mn9j=h+mn8d	3.00E+13	0.0	38000
3010.	mn8j=h+mn8d	3.00E+13	0.0	39000
3011.	mn8j=h+mn7d	3.00E+13	0.0	38000
3012.	mn7j=h+mn7d	3.00E+13	0.0	38000
3013.	mn7j=h+mn6d	3.00E+13	0.0	38000
3014.	mn6j=h+mn6d	3.00E+13	0.0	38000
3015.	mn6j=h+mn5d	3.00E+13	0.0	38000
3016.	mn5j=h+mn5d	3.00E+13	0.0	38000
3017.	mn5j=h+mn4d	3.00E+13	0.0	38000
3018.	mn4j=h+mn4d	3.00E+13	0.0	38000
3019.	mn4j=h+mn3d	3.00E+13	0.0	38000
3020.	mn3j=h+mn3d	3.00E+13	0.0	38000
3021.	mn3j=h+mn2d	3.00E+13	0.0	38000
3022.	mn2j=h+mn2d	3.00E+13	0.0	50500
3023.	mn9j=mn6j	9.90E+07	1.0	17300
3024.	mn9j=mn5j	1.70E+07	1.0	12000
3025.	mn9j=mn4j	2.90E+06	1.0	17400
3026.	mn8j=mn5j	9.90E+07	1.0	17300
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	17300
3027.	mn8j=mn4j	1.70E+07	1.0	12000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+07	1.0	12000
3028.	mn8j=mn3j	2.90E+06	1.0	17400
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.90E+06	1.0	17400
3029.	mn7j=>mn4j	9.90E+07	1.0	17300
3030.	mn7j=>mn3j	1.70E+07	1.0	12000
3031.	mn6j=>mn3j	9.90E+07	1.0	17300
3032.	mn4j=>mn7j	9.90E+07	1.0	17300
3033.	mn3j=>mn7j	1.70E+07	1.0	12000
3034.	mn3j=>mn6j	9.90E+07	1.0	17300
3035.	mn3j=mnmj	2.50E+07	1.0	19500
3036.	mnmj=mn4j	4.35E+06	1.0	24900
3037.	mn2j=mn7j	2.90E+06	1.0	17400
3038.	mn2j=mn6j	1.70E+07	1.0	12000
3039.	mn2j=mn5j	9.90E+07	1.0	17300
3040.	mn2j=mnmj	1.50E+08	1.0	24800
3041.	mn9oo=mn9ooh8j	9.90E+07	1.0	32500
3042.	mn9oo=mn9ooh7j	1.70E+07	1.0	25000
3043.	mn9oo=mn9ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
3044.	mn9oo=mn9ooh5j	5.16E+05	1.0	21000
3045.	mn8oo=mn8ooh9j	1.50E+08	1.0	35500
3046.	mn8oo=mn8ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
3047.	mn8oo=mn8ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
3048.	mn8oo=mn8ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
3049.	mn8oo=mn8ooh4j	5.16E+05	1.0	21000
3050.	mn7oo=mn7ooh9j	2.50E+07	1.0	28000
3051.	mn7oo=mn7ooh8j	9.90E+07	1.0	32500
3052.	mn7oo=mn7ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
3053.	mn7oo=mn7ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
3054.	mn7oo=mn7ooh4j	2.90E+06	1.0	22000
3055.	mn7oo=mn7ooh3j	5.16E+05	1.0	21000
3056.	mn6oo=mn6ooh9j	4.35E+06	1.0	25000
3057.	mn6oo=mn6ooh8j	1.70E+07	1.0	25000
3058.	mn6oo=mn6ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
3059.	mn6oo=mn6ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
3060.	mn6oo=mn6ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
3061.	mn6oo=mn6ooh3j	2.90E+06	1.0	22000
3062.	mn6oo=mn6ooh2j	5.16E+05	1.0	18000
3063.	mn5oo=mn5ooh9j	7.74E+05	1.0	24000
3064.	mn5oo=mn5ooh8j	2.90E+06	1.0	22000
3065.	mn5oo=mn5ooh7j	1.70E+07	1.0	25000
3066.	mn5oo=mn5ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
3067.	mn5oo=mn5ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
3068.	mn5oo=mn5ooh3j	1.70E+07	1.0	25000
3069.	mn5oo=mn5ooh2j	2.90E+06	1.0	19000
3070.	mn4oo=mn4ooh8j	5.16E+05	1.0	21000
3071.	mn4oo=mn4ooh7j	2.90E+06	1.0	22000
3072.	mn4oo=mn4ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
3073.	mn4oo=mn4ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
3074.	mn4oo=mn4ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
3075.	mn4oo=mn4ooh2j	1.70E+07	1.0	20000
3076.	mn3oo=mn3ooh7j	5.16E+05	1.0	21000
3077.	mn3oo=mn3ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
3078.	mn3oo=mn3ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
3079.	mn3oo=mn3ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
3080.	mn3oo=mn3ooh2j	9.90E+07	1.0	29500
3081.	mn2oo=mn2ooh6j	5.16E+05	1.0	21000
3082.	mn2oo=mn2ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
3083.	mn2oo=mn2ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
3084.	mn2oo=mn2ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
3085.	mn2oo=mn2oohmj	4.35E+06	1.0	28500
3086.	mnmoo=mnmooh2j	2.90E+06	1.0	21700
3087.	mn9j+o2=mn8d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3088.	mn8j+o2=mn8d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
3089.	mn8j+o2=mn7d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3090.	mn7j+o2=mn7d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3091.	mn7j+o2=mn6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3092.	mn6j+o2=mn6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3093.	mn6j+o2=mn5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3094.	mn5j+o2=mn5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3095.	mn5j+o2=mn4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3096.	mn4j+o2=mn4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000

3097.	mn4j+o2=mn3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3098.	mn3j+o2=mn3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
3099.	mn3j+o2=mn2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
3100.	mn2j+o2=mn2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
3101.	mn9j+o2=mn9oo	9.00E+18	-2.5	0
3102.	mn8j+o2=mn8oo	1.70E+19	-2.5	0
3103.	mn7j+o2=mn7oo	1.80E+19	-2.5	0
3104.	mn6j+o2=mn6oo	1.80E+19	-2.5	0
3105.	mn5j+o2=mn5oo	1.80E+19	-2.5	0
3106.	mn4j+o2=mn4oo	1.80E+19	-2.5	0
3107.	mn3j+o2=mn3oo	1.05E+19	-2.5	0
3108.	mn2j+o2=mn2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3109.	mnmj+o2=mnmoo	3.50E+11	0.0	-1700
3110.	mn9ooh8j+o2=mn9ooh8oo	1.80E+19	-2.5	0
3111.	mn9ooh7j+o2=mn9ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
3112.	mn9ooh6j+o2=mn9ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
3113.	mn9ooh5j+o2=mn9ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
3114.	mn8ooh9j+o2=mn8ooh9oo	1.50E+18	-2.5	0
3115.	mn8ooh7j+o2=mn8ooh7oo	1.05E+19	-2.5	0
3116.	mn8ooh6j+o2=mn8ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
3117.	mn8ooh5j+o2=mn8ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
3118.	mn8ooh4j+o2=mn8ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
3119.	mn7ooh9j+o2=mn7ooh9oo	9.00E+18	-2.5	0
3120.	mn7ooh8j+o2=mn7ooh8oo	1.05E+19	-2.5	0
3121.	mn7ooh6j+o2=mn7ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
3122.	mn7ooh5j+o2=mn7ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
3123.	mn7ooh4j+o2=mn7ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
3124.	mn7ooh3j+o2=mn7ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
3125.	mn6ooh9j+o2=mn6ooh9oo	9.00E+18	-2.5	0
3126.	mn6ooh8j+o2=mn6ooh8oo	1.70E+19	-2.5	0
3127.	mn6ooh7j+o2=mn6ooh7oo	1.05E+19	-2.5	0
3128.	mn6ooh5j+o2=mn6ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
3129.	mn6ooh4j+o2=mn6ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
3130.	mn6ooh3j+o2=mn6ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
3131.	mn6ooh2j+o2=mn6ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3132.	mn5ooh9j+o2=mn5ooh9oo	9.00E+18	-2.5	0
3133.	mn5ooh8j+o2=mn5ooh8oo	1.70E+19	-2.5	0
3134.	mn5ooh7j+o2=mn5ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
3135.	mn5ooh6j+o2=mn5ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
3136.	mn5ooh4j+o2=mn5ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
3137.	mn5ooh3j+o2=mn5ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
3138.	mn5ooh2j+o2=mn5ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3139.	mn4ooh8j+o2=mn4ooh8oo	1.70E+19	-2.5	0
3140.	mn4ooh7j+o2=mn4ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
3141.	mn4ooh6j+o2=mn4ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
3142.	mn4ooh5j+o2=mn4ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
3143.	mn4ooh3j+o2=mn4ooh3oo	3.00E+18	-2.5	0
3144.	mn4ooh2j+o2=mn4ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3145.	mn3ooh7j+o2=mn3ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
3146.	mn3ooh6j+o2=mn3ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
3147.	mn3ooh5j+o2=mn3ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
3148.	mn3ooh4j+o2=mn3ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
3149.	mn3ooh2j+o2=mn3ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3150.	mn2ooh6j+o2=mn2ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
3151.	mn2ooh5j+o2=mn2ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
3152.	mn2ooh4j+o2=mn2ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
3153.	mn2ooh3j+o2=mn2ooh3oo	1.00E+19	-2.5	0
3154.	mn2oohmj+o2=mn2oohmoo	3.50E+11	0.0	-1700
3155.	mnmooh2j+o2=mnmooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
3156.	mn9oo+mn9j=mn9o+mn9o	7.00E+12	0.0	-1000
3157.	mn9oo+mn8j=mn9o+mn8o	7.00E+12	0.0	-1000
3158.	mn9oo+mn7j=mn9o+mn7o	7.00E+12	0.0	-1000
3159.	mn9oo+mn6j=mn9o+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3160.	mn9oo+mn5j=mn9o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3161.	mn9oo+mn4j=mn9o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3162.	mn9oo+mn3j=mn9o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3163.	mn9oo+mn2j=mn9o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3164.	mn9oo+mnmj=mn9o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3165.	mn8oo+mn8j=mn8o+mn8o	7.00E+12	0.0	-1000
3166.	mn8oo+mn7j=mn8o+mn7o	7.00E+12	0.0	-1000
3167.	mn8oo+mn6j=mn8o+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3168.	mn8oo+mn5j=mn8o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3169.	mn8oo+mn4j=mn8o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3170.	mn8oo+mn3j=mn8o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3171.	mn8oo+mn2j=mn8o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3172.	mn8oo+mnmj=mn8o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3173.	mn7oo+mn7j=mn7o+mn7o	7.00E+12	0.0	-1000
3174.	mn7oo+mn6j=mn7o+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3175.	mn7oo+mn5j=mn7o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3176.	mn7oo+mn4j=mn7o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3177.	mn7oo+mn3j=mn7o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3178.	mn7oo+mn2j=mn7o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3179.	mn7oo+mnmj=mn7o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3180.	mn6oo+mn6j=mn6o+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3181.	mn6oo+mn5j=mn6o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3182.	mn6oo+mn4j=mn6o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3183.	mn6oo+mn3j=mn6o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3184.	mn6oo+mn2j=mn6o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3185.	mn6oo+mnmj=mn6o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3186.	mn5oo+mn5j=mn5o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3187.	mn5oo+mn4j=mn5o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3188.	mn5oo+mn3j=mn5o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3189.	mn5oo+mn2j=mn5o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3190.	mn5oo+mnmj=mn5o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3191.	mn4oo+mn4j=mn4o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3192.	mn4oo+mn3j=mn4o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3193.	mn4oo+mn2j=mn4o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3194.	mn4oo+mnmj=mn4o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3195.	mn3oo+mn3j=mn3o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3196.	mn3oo+mn2j=mn3o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3197.	mn3oo+mnmj=mn3o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3198.	mn2oo+mn2j=mn2o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3199.	mn2oo+mnmj=mn2o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3200.	mnmoo+mnmj=mnmo+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3201.	ho2+mn9j=oh+mn9o	7.00E+12	0.0	-1000
3202.	ho2+mn8j=oh+mn8o	7.00E+12	0.0	-1000
3203.	ho2+mn7j=oh+mn7o	7.00E+12	0.0	-1000
3204.	ho2+mn6j=oh+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3205.	ho2+mn5j=oh+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3206.	ho2+mn4j=oh+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3207.	ho2+mn3j=oh+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3208.	ho2+mn2j=oh+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3209.	ho2+mnmj=oh+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3210.	mn9oo+ch3=mn9o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3211.	mn8oo+ch3=mn8o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3212.	mn7oo+ch3=mn7o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3213.	mn6oo+ch3=mn6o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3214.	mn5oo+ch3=mn5o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3215.	mn4oo+ch3=mn4o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3216.	mn3oo+ch3=mn3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3217.	mn2oo+ch3=mn2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3218.	mnmoo+ch3=mnmo+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
3219.	ch3o2+mn9j=ch3o+mn9o	7.00E+12	0.0	-1000
3220.	ch3o2+mn8j=ch3o+mn8o	7.00E+12	0.0	-1000
3221.	ch3o2+mn7j=ch3o+mn7o	7.00E+12	0.0	-1000
3222.	ch3o2+mn6j=ch3o+mn6o	7.00E+12	0.0	-1000
3223.	ch3o2+mn5j=ch3o+mn5o	7.00E+12	0.0	-1000
3224.	ch3o2+mn4j=ch3o+mn4o	7.00E+12	0.0	-1000
3225.	ch3o2+mn3j=ch3o+mn3o	7.00E+12	0.0	-1000
3226.	ch3o2+mn2j=ch3o+mn2o	7.00E+12	0.0	-1000
3227.	ch3o2+mnmj=ch3o+mnmo	7.00E+12	0.0	-1000
3228.	mn9oo+ho2=mn9ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3229.	mn8oo+ho2=mn8ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3230.	mn7oo+ho2=mn7ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3231.	mn6oo+ho2=mn6ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3232.	mn5oo+ho2=mn5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3233.	mn4oo+ho2=mn4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3234.	mn3oo+ho2=mn3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3235.	mn2oo+ho2=mn2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3236.	mnmoo+ho2=mnmooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
3237.	mn9oo+h2o2=>mn9ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3238.	mn9ooh+ho2=>mn9oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3239.	mn8oo+h2o2=>mn8ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3240.	mn8ooh+ho2=>mn8oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3241.	mn7oo+h2o2=>mn7ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3242.	mn7ooh+ho2=>mn7oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3243.	mn6oo+h2o2=>mn6ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3244.	mn6ooh+ho2=>mn6oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3245.	mn5oo+h2o2=>mn5ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3246.	mn5ooh+ho2=>mn5oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3247.	mn4oo+h2o2=>mn4ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3248.	mn4ooh+ho2=>mn4oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3249.	mn3oo+h2o2=>mn3ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3250.	mn3ooh+ho2=>mn3oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3251.	mn2oo+h2o2=>mn2ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3252.	mn2ooh+ho2=>mn2oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3253.	mnmoo+h2o2=>mnmooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
3254.	mnmooh+ho2=>mnmoo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
3255.	mn9oo+mn9oo=>mn9o+mn9o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3256.	mn9oo+mn8oo=>mn9o+mn8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3257.	mn9oo+mn7oo=>mn8o+mn7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3258.	mn9oo+mn6oo=>mn8o+mn6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3259.	mn9oo+mn5oo=>mn8o+mn5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3260.	mn9oo+mn4oo=>mn8o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3261.	mn9oo+mn3oo=>mn8o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3262.	mn9oo+mn2oo=>mn8o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3263.	mn9oo+mnmoo=>mn8o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3264.	mn8oo+mn8oo=>mn8o+mn8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3265.	mn8oo+mn7oo=>mn8o+mn7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3266.	mn8oo+mn6oo=>mn8o+mn6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3267.	mn8oo+mn5oo=>mn8o+mn5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3268.	mn8oo+mn4oo=>mn8o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3269.	mn8oo+mn3oo=>mn8o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3270.	mn8oo+mn2oo=>mn8o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3271.	mn8oo+mnmoo=>mn8o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3272.	mn7oo+mn7oo=>mn7o+mn7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3273.	mn7oo+mn6oo=>mn7o+mn6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3274.	mn7oo+mn5oo=>mn7o+mn5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3275.	mn7oo+mn4oo=>mn7o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3276.	mn7oo+mn3oo=>mn7o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3277.	mn7oo+mn2oo=>mn7o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3278.	mn7oo+mnmoo=>mn7o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3279.	mn6oo+mn6oo=>mn6o+mn6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3280.	mn6oo+mn5oo=>mn6o+mn5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3281.	mn6oo+mn4oo=>mn6o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3282.	mn6oo+mn3oo=>mn6o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3283.	mn6oo+mn2oo=>mn6o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3284.	mn6oo+mnmoo=>mn6o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3285.	mn5oo+mn5oo=>mn5o+mn5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3286.	mn5oo+mn4oo=>mn5o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3287.	mn5oo+mn3oo=>mn5o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3288.	mn5oo+mn2oo=>mn5o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3289.	mn5oo+mnmoo=>mn5o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3290.	mn4oo+mn4oo=>mn4o+mn4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3291.	mn4oo+mn3oo=>mn4o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3292.	mn4oo+mn2oo=>mn4o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3293.	mn4oo+mnmoo=>mn4o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3294.	mn3oo+mn3oo=>mn3o+mn3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3295.	mn3oo+mn2oo=>mn3o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3296.	mn3oo+mnmoo=>mn3o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3297.	mn2oo+mn2oo=>mn2o+mn2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3298.	mn2oo+mnmoo=>mn2o+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3299.	mnmoo+mnmoo=>mnmo+mnmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3300.	mn9oo+ch3o2=>mn9o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3301.	mn8oo+ch3o2=>mn8o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3302.	mn7oo+ch3o2=>mn7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3303.	mn6oo+ch3o2=>mn6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3304.	mn5oo+ch3o2=>mn5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3305.	mn4oo+ch3o2=>mn4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3306.	mn3oo+ch3o2=>mn3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3307.	mn2oo+ch3o2=>mn2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3308.	mnmoo+ch3o2=>mnmo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
3309.	mn9ooh=mn9o+oh	1.50E+16	0.0	42500
3310.	mn8ooh=mn8o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3311.	mn7ooh=mn7o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3312.	mn6ooh=mn6o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3313.	mn5ooh=mn5o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3314.	mn4ooh=mn4o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3315.	mn3ooh=mn3o+oh	9.45E+15	0.0	41600
3316.	mn2ooh=mn2o+oh	5.95E+15	0.0	42540
3317.	mnmooh=mnmo+oh	1.50E+16	0.0	42500
3318.	ch2o+mo8j=mn9o	1.50E+11	0.0	11900
3319.	ch3cho+mhp7j=mn8o	1.50E+11	0.0	11900
3320.	ch3+mo8*o=mn8o	1.50E+11	0.0	11900
3321.	c2h5cho+mhx6j=mn7o	1.50E+11	0.0	11900
3322.	c2h5+mhp7*o=mn7o	1.50E+11	0.0	11900
3323.	nc3h7cho+mpe5j=mn6o	1.50E+11	0.0	11900
3324.	nc3h7+mhx6*o=mn6o	1.50E+11	0.0	11900
3325.	nc4h9cho+mb4j=mn5o	1.50E+11	0.0	11900
3326.	pc4h9+mpe5*o=mn5o	1.50E+11	0.0	11900
3327.	c5h11cho+mp3j=mn4o	1.50E+11	0.0	11900
3328.	c5h11-1+mb4*o=mn4o	1.50E+11	0.0	11900
3329.	c6h13cho+me2j=mn3o	1.50E+11	0.0	11900
3330.	c6h13-1+mp3*o=mn3o	1.50E+11	0.0	11900
3331.	c7h15cho+ch3oco=mn2o	1.50E+11	0.0	11900
3332.	c7h15-1+me2*o=mn2o	1.50E+11	0.0	11900
3333.	ch2o+naoj=mnmo	1.50E+11	0.0	11900
3334.	mn9*o+h=mn9o	6.63E+09	1.1	4226
3335.	mnm*o+h=mnmo	6.63E+09	1.1	4226
3336.	mn9ooh7j=>mncy9o7+oh	2.04E+11	0.0	19500
3337.	mn9ooh6j=>mncy9o6+oh	3.63E+10	0.0	13000
3338.	mn9ooh5j=>mncy9o5+oh	5.15E+06	0.0	1950
3339.	mn8ooh6j=>mncy8o6+oh	2.04E+11	0.0	19500
3340.	mn8ooh5j=>mncy8o5+oh	3.63E+10	0.0	13000
3341.	mn8ooh4j=>mncy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
3342.	mn7ooh9j=>mncy9o7+oh	4.47E+11	0.0	21900
3343.	mn7ooh5j=>mncy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
3344.	mn7ooh4j=>mncy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
3345.	mn7ooh3j=>mncy7o3+oh	5.15E+06	0.0	1950
3346.	mn6ooh9j=>mncy9o6+oh	5.13E+10	0.0	14800
3347.	mn6ooh8j=>mncy8o6+oh	2.04E+11	0.0	19500
3348.	mn6ooh4j=>mncy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
3349.	mn6ooh3j=>mncy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
3350.	mn6ooh2j=>mncy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
3351.	mn5ooh9j=>mncy9o5+oh	5.15E+06	0.0	1950
3352.	mn5ooh8j=>mncy8o5+oh	3.63E+10	0.0	13000
3353.	mn5ooh7j=>mncy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
3354.	mn5ooh3j=>mncy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
3355.	mn5ooh2j=>mncy5o2+oh	2.57E+10	0.0	11500
3356.	mn4ooh8j=>mncy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
3357.	mn4ooh7j=>mncy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
3358.	mn4ooh6j=>mncy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
3359.	mn4ooh2j=>mncy4o2+oh	3.31E+11	0.0	17400
3360.	mn3ooh7j=>mncy7o3+oh	5.15E+06	0.0	1950
3361.	mn3ooh6j=>mncy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
3362.	mn3ooh5j=>mncy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
3363.	mn2ooh6j=>mncy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
3364.	mn2ooh5j=>mncy5o2+oh	3.63E+10	0.0	13000
3365.	mn2ooh4j=>mncy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
3366.	mn2oohmj=>mncy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
3367.	mnmooh2j=>mncy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
3368.	mncy9o7+h=>mhp7j*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
3369.	mncy9o7+h=>mo7d+hco+h2	4.80E+08	1.5	2785
3370.	mncy9o6+h=>mhp7j6*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
3371.	mncy9o6+h=>mhp6d+ch2cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
3372.	mncy9o5+h=>mhp7j5*o+c2h4+h2	2.40E+08	1.5	2005
3373.	mncy9o5+h=>mhx5d+c2h4cho+h2	4.80E+08	1.5	2785
3374.	mncy8o6+h=>mhx6j*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
3375.	mncy8o6+h=>mhp6d+ch3co+h2	4.80E+08	1.5	2785
3376.	mncy8o5+h=>mhx6j5*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
3377.	mncy8o5+h=>mhx5d+ch3coch2+h2	4.80E+08	1.5	2785
3378.	mncy8o4+h=>mhx6j4*o+c3h6+h2	2.40E+08	1.5	2005
3379.	mncy8o4+h=>mpe4d+acetoch2+h2	4.80E+08	1.5	2785
3380.	mncy7o5+h=>mpe5j*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3381.	mncy7o5+h=>mhx5d+c2h5co+h2	2.40E+08	1.5	2005
3382.	mncy7o4+h=>mpe5j4*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3383.	mncy7o4+h=>mpe4d+c2h5coch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
3384.	mncy7o3+h=>mpe5j3*o+c4h8-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3385.	mncy7o3+h=>mb3d+etcoetp+h2	2.40E+08	1.5	2005
3386.	mncy6o4+h=>mb4j*o+c5h10-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3387.	mncy6o4+h=>mpe4d+nc3h7co+h2	2.40E+08	1.5	2005
3388.	mncy6o3+h=>mb4j3*o+c5h10-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3389.	mncy6o3+h=>mb3d+nc3h7coch2+h2	2.40E+08	1.5	2005
3390.	mncy6o2+h=>mp2d+nprcoetp+h2	9.60E+08	1.5	2005
3391.	mncy5o3+h=>mp3j*o+c6h12-1+h2	2.40E+08	1.5	2005
3392.	mncy5o3+h=>mb3d+nc4h9co+h2	2.40E+08	1.5	2005
3393.	mncy5o2+h=>mp3j2*o+c6h12-1+h2	4.80E+08	1.5	2005
3394.	mncy5o2+h=>mp2d+nc4h9coch2+h2	9.60E+08	1.5	2005
3395.	mncy4o2+h=>mp2d+c5h11co+h2	9.60E+08	1.5	2005
3396.	mncy2om+h=>c7h15coco+ch2o+h2	4.80E+08	1.5	2005
3397.	mncy2om+h=>c8h16co+ocho+h2	4.80E+08	1.5	2785
3398.	mncy9o7+oh=>mhp7j*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3399.	mncy9o7+oh=>mo7d+hco+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
3400.	mncy9o6+oh=>mhp7j6*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3401.	mncy9o6+oh=>mhp6d+ch2cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
3402.	mncy9o5+oh=>mhp7j5*o+c2h4+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3403.	mncy9o5+oh=>mhx5d+c2h4cho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
3404.	mncy8o6+oh=>mhx6j*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3405.	mncy8o6+oh=>mhp6d+ch3co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3406.	mncy8o5+oh=>mhx6j5*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3407.	mncy8o5+oh=>mhx5d+ch3coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3408.	mncy8o4+oh=>mhx6j4*o+c3h6+h2o	1.20E+06	2.0	-1192

3409.	mncy8o4+oh=>mpe4d+acetoch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3410.	mncy7o5+oh=>mpe5j*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3411.	mncy7o5+oh=>mhx5d+c2h5co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3412.	mncy7o4+oh=>mpe5j4*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3413.	mncy7o4+oh=>mpe4d+c2h5coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3414.	mncy7o3+oh=>mpe5j3*o+c4h8-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3415.	mncy7o3+oh=>mb3d+etcoetp+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3416.	mncy6o4+oh=>mb4j*o+c5h10-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3417.	mncy6o4+oh=>mpe4d+nc3h7co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3418.	mncy6o3+oh=>mb4j3*o+c5h10-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3419.	mncy6o3+oh=>mb3d+nc3h7coch2+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3420.	mncy6o2+oh=>mp2d+nprcoetp+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
3421.	mncy5o3+oh=>mp3j*o+c6h12-1+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3422.	mncy5o3+oh=>mb3d+nc4h9co+h2o	1.20E+06	2.0	-1192
3423.	mncy5o2+oh=>mp2d+nc4h9coch2+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
3424.	mncy4o2+oh=>mp2d+c5h11co+h2o	4.80E+06	2.0	-1192
3425.	mncy2om+oh=>c8h16co+ocho+h2o	2.40E+06	2.0	-1192
3426.	mncy9o7+ho2=>mhp7j*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3427.	mncy9o7+ho2=>mo7d+hco+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
3428.	mncy9o6+ho2=>mhp7j6*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3429.	mncy9o6+ho2=>mhp6d+ch2cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
3430.	mncy9o5+ho2=>mhp7j5*o+c2h4+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3431.	mncy9o5+ho2=>mhx5d+c2h4cho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
3432.	mncy8o6+ho2=>mhx6j*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3433.	mncy8o6+ho2=>mhp6d+ch3co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3434.	mncy8o5+ho2=>mhx6j5*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3435.	mncy8o5+ho2=>mhx5d+ch3coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3436.	mncy8o4+ho2=>mhx6j4*o+c3h6+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3437.	mncy8o4+ho2=>mpe4d+acetoch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3438.	mncy7o5+ho2=>mpe5j*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3439.	mncy7o5+ho2=>mhx5d+c2h5co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3440.	mncy7o4+ho2=>mpe5j4*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3441.	mncy7o4+ho2=>mpe4d+c2h5coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3442.	mncy7o3+ho2=>mpe5j3*o+c4h8-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3443.	mncy7o3+ho2=>mb3d+etcoetp+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3444.	mncy6o4+ho2=>mb4j*o+c5h10-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3445.	mncy6o4+ho2=>mpe4d+nc3h7co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3446.	mncy6o3+ho2=>mb4j3*o+c5h10-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3447.	mncy6o3+ho2=>mb3d+nc3h7coch2+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3448.	mncy6o2+ho2=>mp2d+nprcoetp+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
3449.	mncy5o3+ho2=>mp3j*o+c6h12-1+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3450.	mncy5o3+ho2=>mb3d+nc4h9co+h2o2	2.00E+12	0.0	13260
3451.	mncy5o2+ho2=>mp2d+nc4h9coch2+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
3452.	mncy4o2+ho2=>mp2d+c5h11co+h2o2	8.00E+12	0.0	13260
3453.	mncy2om+ho2=>c8h16co+ocho+h2o2	4.00E+12	0.0	14400
3454.	mncy9o7+ch3o=>mhp7j*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3455.	mncy9o7+ch3o=>mo7d+hco+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
3456.	mncy9o6+ch3o=>mhp7j6*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3457.	mncy9o6+ch3o=>mhp6d+ch2cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
3458.	mncy9o5+ch3o=>mhp7j5*o+c2h4+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3459.	mncy9o5+ch3o=>mhx5d+c2h4cho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
3460.	mncy8o6+ch3o=>mhx6j*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3461.	mncy8o6+ch3o=>mhp6d+ch3co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3462.	mncy8o5+ch3o=>mhx6j5*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3463.	mncy8o5+ch3o=>mhx5d+ch3coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3464.	mncy8o4+ch3o=>mhx6j4*o+c3h6+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3465.	mncy8o4+ch3o=>mpe4d+acetoch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3466.	mncy7o5+ch3o=>mpe5j*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3467.	mncy7o5+ch3o=>mhx5d+c2h5co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3468.	mncy7o4+ch3o=>mpe5j4*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3469.	mncy7o4+ch3o=>mpe4d+c2h5coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3470.	mncy7o3+ch3o=>mpe5j3*o+c4h8-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3471.	mncy7o3+ch3o=>mb3d+etcoetp+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3472.	mncy6o4+ch3o=>mb4j*o+c5h10-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3473.	mncy6o4+ch3o=>mpe4d+nc3h7co+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3474.	mncy6o3+ch3o=>mb4j3*o+c5h10-1+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3475.	mncy6o3+ch3o=>mb3d+nc3h7coch2+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3476.	mncy6o2+ch3o=>mp2d+nprcoetp+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
3477.	mncy5o3+ch3o=>mp3j*o+c6h12-1+ch3oh	2.00E+12	0.0	13260
3478.	mncy5o3+ch3o=>mb3d+nc4h9co+ch3oh	2.00E+12	0.0	13260
3479.	mncy5o2+ch3o=>mp2d+nc4h9coch2+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
3480.	mncy4o2+ch3o=>mp2d+c5h11co+ch3oh	4.38E+11	0.0	5000
3481.	mncy2om+ch3o=>c8h16co+ocho+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
3482.	mncy9o7+ch3o2=>mhp7j*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3483.	mncy9o7+ch3o2=>mo7d+hco+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
3484.	mncy9o6+ch3o2=>mhp7j6*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3485.	mncy9o6+ch3o2=>mhp6d+ch2cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
3486.	mncy9o5+ch3o2=>mhp7j5*o+c2h4+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700

3487.	mncy9o5+ch3o2=>mhx5d+c2h4cho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
3488.	mncy8o6+ch3o2=>mhx6j*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3489.	mncy8o6+ch3o2=>mhp6d+ch3co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3490.	mncy8o5+ch3o2=>mhx6j5*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3491.	mncy8o5+ch3o2=>mhx5d+ch3coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3492.	mncy8o4+ch3o2=>mhx6j4*o+c3h6+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3493.	mncy8o4+ch3o2=>mpe4d+acetoch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3494.	mncy7o5+ch3o2=>mpe5j*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3495.	mncy7o5+ch3o2=>mhx5d+c2h5co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3496.	mncy7o4+ch3o2=>mpe5j4*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3497.	mncy7o4+ch3o2=>mpe4d+c2h5coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3498.	mncy7o3+ch3o2=>mpe5j3*o+c4h8-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3499.	mncy7o3+ch3o2=>mb3d+etcoetp+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3500.	mncy6o4+ch3o2=>mb4j*o+c5h10-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3501.	mncy6o4+ch3o2=>mpe4d+nc3h7co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3502.	mncy6o3+ch3o2=>mb4j3*o+c5h10-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3503.	mncy6o3+ch3o2=>mb3d+nc3h7coch2+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3504.	mncy6o2+ch3o2=>mp2d+nprcoetp+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
3505.	mncy5o3+ch3o2=>mp3j*o+c6h12-1+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3506.	mncy5o3+ch3o2=>mb3d+nc4h9co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	17700
3507.	mncy5o2+ch3o2=>mp2d+nc4h9coch2+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
3508.	mncy4o2+ch3o2=>mp2d+c5h11co+ch3o2h	8.00E+12	0.0	17700
3509.	mncy2om+ch3o2=>c8h16co+ocho+ch3o2h	4.00E+12	0.0	17700
3510.	mn8d+ho2=mn9ooh8j	1.50E+11	0.0	7800
3511.	mn8d+ho2=mn8ooh9j	1.50E+11	0.0	7800
3512.	mn7d+ho2=mn8ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
3513.	mn7d+ho2=mn7ooh8j	1.50E+11	0.0	7800
3514.	mn6d+ho2=mn7ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
3515.	mn6d+ho2=mn6ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
3516.	mn5d+ho2=mn6ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
3517.	mn5d+ho2=mn5ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
3518.	mn4d+ho2=mn5ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
3519.	mn4d+ho2=mn4ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
3520.	mn3d+ho2=mn4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
3521.	mn3d+ho2=mn3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
3522.	mn2d+ho2=mn3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
3523.	mn2d+ho2=mn2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
3524.	mn9ooh7j=>mo7d+ch2o+oh	2.00E+13	0.0	31000
3525.	mn9ooh6j=>mhp6d+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700
3526.	mn9ooh5j=>mhx5d+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700
3527.	mn8ooh6j=>mhp6d+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3528.	mn8ooh5j=>mhx5d+prooh2-1	2.00E+13	0.0	28700
3529.	mn8ooh4j=>mpe4d+c2h4+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3530.	mn7ooh9j=>mhp7*o+c2h4+oh	2.00E+13	0.0	28700
3531.	mn7ooh5j=>mhx5d+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3532.	mn7ooh4j=>mpe4d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3533.	mn7ooh3j=>mb3d+c2h4+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3534.	mn6ooh9j=>mhp6ooh7j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
3535.	mn6ooh8j=>mhx6*o+c3h6+oh	2.00E+13	0.0	28700
3536.	mn6ooh4j=>mpe4d+nc3h7cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3537.	mn6ooh3j=>mb3d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3538.	mn6ooh2j=>mp2d+nc3h7cho+c2h4+oh	2.00E+13	0.0	28700
3539.	mn5ooh9j=>mhp5ooh7j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
3540.	mn5ooh8j=>mhx5d+c3h6+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3541.	mn5ooh7j=>mpe5*o+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
3542.	mn5ooh3j=>mb3d+nc4h9cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3543.	mn5ooh2j=>mp2d+c6h12-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3544.	mn4ooh8j=>mhx4ooh6j+c3h6	2.00E+13	0.0	28700
3545.	mn4ooh7j=>mpe4d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3546.	mn4ooh6j=>mb4*o+c5h10-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
3547.	mn4ooh2j=>mp2d+c5h11cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3548.	mn3ooh7j=>mpe3ooh5j+c4h8-1	2.00E+13	0.0	28700
3549.	mn3ooh6j=>mb3d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3550.	mn3ooh5j=>mp3*o+c6h12-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
3551.	mn2ooh6j=>mb2ooh4j+c5h10-1	2.00E+13	0.0	28700
3552.	mn2ooh5j=>mp2d+c6h12-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
3553.	mn2ooh4j=>me2*o+c7h14-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
3554.	mn2oohmj=>ch2o+co+c7h15cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
3555.	mn9ooh8oo=>mn8ooh9*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
3556.	mn9ooh7oo=>mn7ooh9*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
3557.	mn9ooh6oo=>mn6ooh9*o+oh	2.90E+06	1.0	20000
3558.	mn9ooh5oo=>mn5ooh9*o+oh	5.16E+05	1.0	19000
3559.	mn8ooh9oo=>mn9ooh8*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3560.	mn8ooh7oo=>mn7ooh8*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3561.	mn8ooh6oo=>mn6ooh8*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3562.	mn8ooh5oo=>mn5ooh8*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3563.	mn8ooh4oo=>mn4ooh8*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3564.	mn7ooh9oo=>mn9ooh7*o+oh	8.60E+06	1.0	20000

3565.	mn7ooh8oo=>mn8ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3566.	mn7ooh6oo=>mn6ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3567.	mn7ooh5oo=>mn5ooh7*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3568.	mn7ooh4oo=>mn4ooh7*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3569.	mn7ooh3oo=>mn3ooh7*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3570.	mn6ooh9oo=>mn9ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3571.	mn6ooh8oo=>mn8ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3572.	mn6ooh7oo=>mn7ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3573.	mn6ooh5oo=>mn5ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3574.	mn6ooh4oo=>mn4ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3575.	mn6ooh3oo=>mn3ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3576.	mn6ooh2oo=>mn2ooh6*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3577.	mn5ooh9oo=>mn9ooh5*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3578.	mn5ooh8oo=>mn8ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3579.	mn5ooh7oo=>mn7ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3580.	mn5ooh6oo=>mn6ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3581.	mn5ooh4oo=>mn4ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3582.	mn5ooh3oo=>mn3ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3583.	mn5ooh2oo=>mn2ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3584.	mn4ooh8oo=>mn8ooh4*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3585.	mn4ooh7oo=>mn7ooh4*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3586.	mn4ooh6oo=>mn6ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3587.	mn4ooh5oo=>mn5ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3588.	mn4ooh3oo=>mn3ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3589.	mn4ooh2oo=>mn2ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3590.	mn3ooh7oo=>mn7ooh3*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
3591.	mn3ooh6oo=>mn6ooh3*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
3592.	mn3ooh5oo=>mn5ooh3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
3593.	mn3ooh4oo=>mn4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3594.	mn3ooh2oo=>mn2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
3595.	mn2ooh6oo=>mn6ooh2*o+oh	2.60E+05	1.0	14000
3596.	mn2ooh5oo=>mn5ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	15000
3597.	mn2ooh4oo=>mn4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
3598.	mn2ooh3oo=>mn3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
3599.	mn2oohmoo=>mnmooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
3600.	mnmooh2oo=>mn2oohm*o+oh	2.90E+06	1.0	28500
3601.	mn9ooh8oo=>mn8ooh9oo	7.27E+09	0.0	12700
3602.	mn8ooh9oo=>mn9ooh8oo	7.27E+09	0.0	12700
3603.	mn8ooh7oo=>mn7ooh8oo	7.27E+09	0.0	12700
3604.	mn7ooh8oo=>mn8ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700
3605.	mn7ooh6oo=>mn6ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700
3606.	mn6ooh7oo=>mn7ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
3607.	mn6ooh5oo=>mn5ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
3608.	mn5ooh6oo=>mn6ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
3609.	mn5ooh4oo=>mn4ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
3610.	mn4ooh5oo=>mn5ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
3611.	mn4ooh3oo=>mn3ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
3612.	mn3ooh4oo=>mn4ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
3613.	mn3ooh2oo=>mn2ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
3614.	mn2ooh3oo=>mn3ooh2oo	7.27E+09	0.0	12700
3615.	mn8ooh9*o=>mo8*o+hco+oh	1.00E+16	0.0	43000
3616.	mn7ooh9*o=>mhp7*o+ch2cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3617.	mn6ooh9*o=>mpe5j+choc2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3618.	mn6ooh9*o=>mhx6*o+c2h4cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3619.	mn5ooh9*o=>mpe5*o+c3h6cho-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
3620.	mn5ooh9*o=>mb4j+choc3h6cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3621.	mn9ooh8*o=>mo8j*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
3622.	mn7ooh8*o=>mhp7*o+ch3co+oh	1.00E+16	0.0	43000
3623.	mn6ooh8*o=>mhx6*o+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
3624.	mn5ooh8*o=>mpe5*o+acetoch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
3625.	mn5ooh8*o=>mb4j+c5ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3626.	mn4ooh8*o=>mb4*o+c3h6coch3-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
3627.	mn4ooh8*o=>mp3j+c6ald5oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3628.	mn9ooh7*o=>mo8j7*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
3629.	mn8ooh7*o=>mhp7j*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3630.	mn6ooh7*o=>mhx6*o+c2h5co+oh	1.00E+16	0.0	43000
3631.	mn6ooh7*o=>mpe5j+c4ald2oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3632.	mn5ooh7*o=>mpe5*o+c2h5coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
3633.	mn5ooh7*o=>mb4j+c5ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3634.	mn4ooh7*o=>mb4*o+etcoetp+oh	1.00E+16	0.0	43000
3635.	mn4ooh7*o=>mp3j+c6ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3636.	mn3ooh7*o=>me2j+c7ald5oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3637.	mn3ooh7*o=>mp3*o+c2h5coc3h6+oh	1.00E+16	0.0	43000
3638.	mn9ooh6*o=>mo8j6*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
3639.	mn8ooh6*o=>mhp7j6*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3640.	mn7ooh6*o=>mhx6j*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3641.	mn5ooh6*o=>mpe5*o+nc3h7co+oh	1.00E+16	0.0	43000
3642.	mn4ooh6*o=>mb4*o+nc3h7coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000

3643.	mn4ooh6*o=>mp3j+c6ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3644.	mn3ooh6*o=>mp3*o+nprcoetp+oh	1.00E+16	0.0	43000
3645.	mn3ooh6*o=>me2j+c7ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3646.	mn2ooh6*o=>ch3oco+c8ald5oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3647.	mn2ooh6*o=>me2*o+prcopr-1+oh	1.00E+16	0.0	43000
3648.	mn9ooh5*o=>mo8j5*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
3649.	mn8ooh5*o=>mhp7j5*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3650.	mn7ooh5*o=>mhx6j5*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3651.	mn6ooh5*o=>mpe5j*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3652.	mn4ooh5*o=>mb4*o+nc4h9co+oh	1.00E+16	0.0	43000
3653.	mn3ooh5*o=>mp3*o+nc4h9coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
3654.	mn3ooh5*o=>me2j+c7ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3655.	mn2ooh5*o=>ch3oco+c8ald4oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3656.	mn8ooh4*o=>mhp7j4*o+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3657.	mn7ooh4*o=>mhx6j4*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3658.	mn6ooh4*o=>mpe5j4*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3659.	mn5ooh4*o=>mb4j*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3660.	mn3ooh4*o=>mp3*o+c5h11co+oh	1.00E+16	0.0	43000
3661.	mn2ooh4*o=>me2*o+nc5h11coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
3662.	mn2ooh4*o=>ch3oco+c8ald3oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3663.	mn7ooh3*o=>mhx6j3*o+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3664.	mn6ooh3*o=>mpe5j3*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3665.	mn5ooh3*o=>mb4j3*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3666.	mn4ooh3*o=>mp3j*o+c5h11cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3667.	mn2ooh3*o=>ch3oco+c8ald2oxo+oh	1.00E+16	0.0	43000
3668.	mn6ooh2*o=>mpe5j2*o+nc3h7cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3669.	mn5ooh2*o=>mb4j2*o+nc4h9cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3670.	mn4ooh2*o=>mp3j2*o+c5h11cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3671.	mn3ooh2*o=>me2j*o+c6h13cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3672.	mnmooh2*o=>naoj2*o+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
3673.	mn2oohm*o=>chooco+c7h15cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
3674.	hco+mo8j=mn9*o	1.00E+13	0.0	0
3675.	mn9*o+o2=mn9j*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
3676.	mn9*o+h=mn9j*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
3677.	mn9*o+oh=mn9j*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
3678.	mn9*o+o=mn9j*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
3679.	mn9*o+ho2=mn9j*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
3680.	mn9j*o=mo8j+co	1.83E+15	-0.7	12910
3681.	mnm*o+o2=mnmj*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
3682.	mnm*o+h=mnmj*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
3683.	mnm*o+oh=mnmj*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
3684.	mnm*o+o=mnmj*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
3685.	mnm*o+ho2=mnmj*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
3686.	mnmj*o=naoj+co	1.83E+15	-0.7	12910
3687.	me2j+c7h1317(+m)=mn8d(+m)	4.90E+14	-0.5	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+0	
3688.	mn8d=mp3j+c6h1116	1.58E+17	0.0	87040
3689.	mn8d=mb4j+c5h915	1.58E+17	0.0	87040
3690.	mn8d=mpe5j+c4h7-4	1.58E+17	0.0	87040
3691.	mn8d=mhx6j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
3692.	c2h3+mhp7j=mn8d	2.05E+13	0.0	0
3693.	mn8d7j+h=mn8d	1.00E+13	0.0	0
3694.	mn7d6j+h=mn7d	1.00E+13	0.0	0
3695.	mn6d5j+h=mn6d	1.00E+13	0.0	0
3696.	mn5d4j+h=mn5d	1.00E+13	0.0	0
3697.	mn4d3j+h=mn4d	1.00E+13	0.0	0
3698.	mn3d2j+h=mn3d	1.00E+13	0.0	0
3699.	mn8d+o=mn8d7j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3700.	mn8d+o=mn8d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3701.	mn8d+h=mn8d7j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3702.	mn8d+h=mn8d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3703.	mn8d+oh=mn8d7j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3704.	mn8d+oh=mn8d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3705.	mn8d+ho2=mn8d7j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3706.	mn8d+ho2=mn8d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3707.	mn8d+ch3o=mn8d7j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3708.	mn8d+ch3o=mn8d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3709.	mn8d+o2=mn8d7j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3710.	mn8d+o2=mn8d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3711.	mn7d+o=mn8d7j+oh	1.74E+11	0.7	5900
3712.	mn7d+o=mn7d6j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3713.	mn7d+o=mn7d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3714.	mn7d+h=mn8d7j+h2	1.74E+05	2.5	2510
3715.	mn7d+h=mn7d6j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3716.	mn7d+h=mn7d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3717.	mn7d+oh=mn8d7j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
3718.	mn7d+oh=mn7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520

3719. mn7d+oh=mn7d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3720. mn7d+ho2=mn8d7j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
3721. mn7d+ho2=mn7d6j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3722. mn7d+ho2=mn7d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3723. mn7d+ch3o=mn8d7j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
3724. mn7d+ch3o=mn7d6j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3725. mn7d+ch3o=mn7d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3726. mn7d+o2=mn7d6j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3727. mn7d+o2=mn8d7j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
3728. mn7d+o2=mn7d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3729. mn6d+o=mn7d6j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3730. mn6d+o=mn6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3731. mn6d+o=mn6d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3732. mn6d+h=mn7d6j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3733. mn6d+h=mn6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3734. mn6d+h=mn6d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3735. mn6d+oh=mn7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3736. mn6d+oh=mn6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3737. mn6d+oh=mn6d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3738. mn6d+ho2=mn7d6j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3739. mn6d+ho2=mn6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3740. mn6d+ho2=mn6d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3741. mn6d+ch3o=mn7d6j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3742. mn6d+ch3o=mn6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3743. mn6d+ch3o=mn6d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3744. mn6d+o2=mn7d6j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
3745. mn6d+o2=mn6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3746. mn6d+o2=mn6d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3747. mn5d+o=mn6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3748. mn5d+o=mn5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3749. mn5d+o=mn5d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3750. mn5d+h=mn6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3751. mn5d+h=mn5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3752. mn5d+h=mn5d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3753. mn5d+oh=mn6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3754. mn5d+oh=mn5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3755. mn5d+oh=mn5d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3756. mn5d+ho2=mn6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3757. mn5d+ho2=mn5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3758. mn5d+ho2=mn5d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3759. mn5d+ch3o=mn6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3760. mn5d+ch3o=mn5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3761. mn5d+ch3o=mn5d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3762. mn5d+o2=mn6d5j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
3763. mn5d+o2=mn5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3764. mn5d+o2=mn5d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3765. mn4d+o=mn5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3766. mn4d+o=mn4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3767. mn4d+o=mn4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3768. mn4d+h=mn5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3769. mn4d+h=mn4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3770. mn4d+h=mn4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3771. mn4d+oh=mn5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3772. mn4d+oh=mn4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3773. mn4d+oh=mn4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3774. mn4d+ho2=mn5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3775. mn4d+ho2=mn4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3776. mn4d+ho2=mn4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3777. mn4d+ch3o=mn5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3778. mn4d+ch3o=mn4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3779. mn4d+ch3o=mn4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3780. mn4d+o2=mn4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3781. mn4d+o2=mn5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3782. mn4d+o2=mn4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3783. mn3d+o=mn4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3784. mn3d+o=mn3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3785. mn3d+h=mn4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3786. mn3d+h=mn3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3787. mn3d+oh=mn4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3788. mn3d+oh=mn3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3789. mn3d+ho2=mn4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3790. mn3d+ho2=mn3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3791. mn3d+ch3o=mn4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3792. mn3d+ch3o=mn3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3793. mn3d+o2=mn4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3794. mn3d+o2=mn3d2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3795. mn2d+o=mn3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
3796. mn2d+h=mn3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
3797. mn2d+oh=mn3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
3798. mn2d+ho2=mn3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3799. mn2d+ch3o=mn3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
3800. mn2d+o2=mn3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
3801. mn8d+o=mo8j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
3802. mn7d+o=mhp7j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
3803. mn6d+o=mhx6j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
3804. mn5d+o=mpe5j+nc3h7co	1.00E+11	0.0	-1050
3805. mn4d+o=mb4j+nc4h9co	1.00E+11	0.0	-1050
3806. mn3d+o=mp3j+c5h11co	1.00E+11	0.0	-1050
3807. mn2d+o=me2j+c6h13co	1.00E+11	0.0	-1050
3808. mn8d7j=c4h6+mpe5j	1.30E+13	0.0	35900
3809. mn8d2j=c6h1116+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
3810. c8h14co+ch3o=mn8d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3811. mn7d6j=c5h813+mb4j	1.30E+13	0.0	35900
3812. mn7d2j=c6h1114+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
3813. c8h14co+ch3o=mn7d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3814. mn6d5j=c6h1013+mp3j	1.30E+13	0.0	35900
3815. mn6d5j=mo7d5d+ch3	1.30E+13	0.0	38200
3816. mn6d2j=c6h1113+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
3817. c8h14co+ch3o=mn6d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3818. mn5d4j=c7h1213+me2j	1.30E+13	0.0	35900
3819. mn5d4j=mhp6d4d+c2h5	1.30E+13	0.0	38200
3820. mn5d2j=c6h1113+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
3821. c8h14co+ch3o=mn5d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3822. mn4d3j=c8h1413+ch3oco	1.30E+13	0.0	33900
3823. mn4d3j=mhx5d3d+nc3h7	1.30E+13	0.0	35900
3824. mn4d2j=mp2d+c6h1116	1.30E+13	0.0	50000
3825. c8h14co+ch3o=mn4d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3826. mn3d2j=mpe4d2d+pc4h9	1.30E+13	0.0	35900
3827. c8h14co+ch3o=mn3d2j	5.00E+11	0.0	-1000
3828. md=md10j+h	7.90E+15	0.0	97970
3829. md=md9j+h	5.00E+15	0.0	94990
3830. md=md8j+h	5.00E+15	0.0	94990
3831. md=md7j+h	5.00E+15	0.0	94990
3832. md=md6j+h	5.00E+15	0.0	94990
3833. md=md5j+h	5.00E+15	0.0	94990
3834. md=md4j+h	5.00E+15	0.0	94990
3835. md=md3j+h	5.00E+15	0.0	94990
3836. md2j+h=md	1.00E+14	0.0	0
3837. md=mdmj+h	7.90E+15	0.0	93970
3838. md=m9j+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
3839. md=mo8j+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
3840. md=mhp7j+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
3841. md=mhx6j+pc4h9	1.58E+17	0.0	87040
3842. md=mpe5j+c5h11-1	1.58E+17	0.0	87040
3843. md=mb4j+c6h13-1	1.58E+17	0.0	87040
3844. md=mp3j+c7h15-1	1.58E+17	0.0	87040
3845. md=me2j+c8h17-1	1.58E+17	0.0	87040
3846. md=ch3oco+c9h19-1	1.13E+16	0.0	81700
3847. c9h19co+ch3o=md	3.00E+13	0.0	0
3848. md=daoj+ch3	3.16E+16	0.0	83070
3849. md=>c9h18co+ch3oh	3.80E+11	0.0	57500
3850. md+o2=md10j+ho2	2.00E+13	0.0	50870
3851. md+o2=md9j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3852. md+o2=md8j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3853. md+o2=md7j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3854. md+o2=md6j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3855. md+o2=md5j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3856. md+o2=md4j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3857. md+o2=md3j+ho2	4.00E+13	0.0	47690
3858. md+o2=md2j+ho2	4.00E+13	0.0	45200
3859. md+o2=mdmj+ho2	2.05E+13	0.0	44910
3860. co2+c9h19-1=daoj	1.00E+11	0.0	39360
3861. md+h=md10j+h2	9.40E+04	2.8	6280
3862. md+h=md9j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3863. md+h=md8j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3864. md+h=md7j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3865. md+h=md6j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3866. md+h=md5j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3867. md+h=md4j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3868. md+h=md3j+h2	1.30E+06	2.4	4471
3869. md+h=md2j+h2	1.20E+06	2.4	2583
3870. md+h=mdmj+h2	9.40E+04	2.8	6280
3871. md+o=md10j+oh	9.65E+04	2.7	3716
3872. md+o=md9j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3873. md+o=md8j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3874. md+o=md7j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3875. md+o=md6j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3876. md+o=md5j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3877. md+o=md4j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3878. md+o=md3j+oh	4.77E+04	2.7	2106
3879. md+o=md2j+oh	3.94E+05	2.4	1150
3880. md+o=mdmj+oh	1.05E+06	2.4	4766
3881. md+oh=md10j+h2o	5.25E+09	1.0	1590
3882. md+oh=md9j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3883. md+oh=md8j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3884. md+oh=md7j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3885. md+oh=md6j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3886. md+oh=md5j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3887. md+oh=md4j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3888. md+oh=md3j+h2o	4.68E+07	1.6	-35
3889. md+oh=md2j+h2o	5.85E+04	2.5	-1659
3890. md+oh=mdmj+h2o	5.27E+09	1.0	1590
3891. md+ho2=md10j+h2o2	8.40E+12	0.0	20440
3892. md+ho2=md9j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3893. md+ho2=md8j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3894. md+ho2=md7j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3895. md+ho2=md6j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3896. md+ho2=md5j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3897. md+ho2=md4j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3898. md+ho2=md3j+h2o2	5.60E+12	0.0	17690
3899. md+ho2=md2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
3900. md+ho2=mdmj+h2o2	4.05E+04	2.5	16690
3901. md+hco=md10j+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
3902. md+hco=md9j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3903. md+hco=md8j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3904. md+hco=md7j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3905. md+hco=md6j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3906. md+hco=md5j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3907. md+hco=md4j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3908. md+hco=md3j+ch2o	1.08E+07	1.9	17000
3909. md+hco=md2j+ch2o	1.14E+09	1.3	15500
3910. md+hco=mdmj+ch2o	1.02E+05	2.5	18500
3911. md+ch3=md10j+ch4	4.52E-01	3.6	7154
3912. md+ch3=md9j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3913. md+ch3=md8j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3914. md+ch3=md7j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3915. md+ch3=md6j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3916. md+ch3=md5j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3917. md+ch3=md4j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3918. md+ch3=md3j+ch4	2.70E+04	2.3	7287
3919. md+ch3=md2j+ch4	1.00E+11	0.0	7300
3920. md+ch3=mdmj+ch4	4.52E-01	3.6	7154
3921. md+ch3o=md10j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
3922. md+ch3o=md9j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3923. md+ch3o=md8j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3924. md+ch3o=md7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3925. md+ch3o=md6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3926. md+ch3o=md5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3927. md+ch3o=md4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3928. md+ch3o=md3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3929. md+ch3o=md2j+ch3oh	3.80E+10	0.0	2800
3930. md+ch3o=mdmj+ch3oh	1.50E+10	0.0	7000
3931. md+ch2oh=md10j+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
3932. md+ch2oh=md9j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3933. md+ch2oh=md8j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3934. md+ch2oh=md7j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3935. md+ch2oh=md6j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3936. md+ch2oh=md5j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3937. md+ch2oh=md4j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3938. md+ch2oh=md3j+ch3oh	1.10E+11	0.0	5000
3939. md+ch2oh=md2j+ch3oh	3.60E+01	3.0	10000
3940. md+ch2oh=mdmj+ch3oh	1.58E+11	0.0	7000
3941. md+ch3o2=md10j+ch3o2h	8.40E+12	0.0	20440
3942. md+ch3o2=md9j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3943. md+ch3o2=md8j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3944. md+ch3o2=md7j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3945. md+ch3o2=md6j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3946. md+ch3o2=md5j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3947. md+ch3o2=md4j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3948. md+ch3o2=md3j+ch3o2h	5.60E+12	0.0	17690
3949. md+ch3o2=md2j+ch3o2h	6.40E+03	2.6	12400
3950. md+ch3o2=mdmj+ch3o2h	4.05E+04	2.5	16690
3951. md+c2h3=md10j+c2h4	5.01E+11	0.0	18000
3952. md+c2h3=md9j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3953. md+c2h3=md8j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3954. md+c2h3=md7j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3955. md+c2h3=md6j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3956. md+c2h3=md5j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3957. md+c2h3=md4j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3958. md+c2h3=md3j+c2h4	4.00E+11	0.0	16800
3959. md+c2h3=md2j+c2h4	4.00E+11	0.0	14300
3960. md+c2h3=mdmj+c2h4	5.00E+11	0.0	18000
3961. md+c2h5=md10j+c2h6	5.01E+10	0.0	13400
3962. md+c2h5=md9j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3963. md+c2h5=md8j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3964. md+c2h5=md7j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3965. md+c2h5=md6j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3966. md+c2h5=md5j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3967. md+c2h5=md4j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3968. md+c2h5=md3j+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
3969. md+c2h5=md2j+c2h6	2.20E+00	3.5	4140
3970. md+c2h5=mdmj+c2h6	5.00E+10	0.0	13400
3971. md+c3h5-a=md10j+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
3972. md+c3h5-a=md9j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3973. md+c3h5-a=md8j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3974. md+c3h5-a=md7j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3975. md+c3h5-a=md6j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3976. md+c3h5-a=md5j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3977. md+c3h5-a=md4j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3978. md+c3h5-a=md3j+c3h6	8.00E+01	3.3	18170
3979. md+c3h5-a=md2j+c3h6	8.00E+01	3.3	17170
3980. md+c3h5-a=mdmj+c3h6	1.20E+02	3.3	19840
3981. md+md2j=md10j+md	1.20E+02	3.3	19840
3982. md+md2j=md9j+md	8.00E+01	3.3	18170
3983. md+md2j=md8j+md	8.00E+01	3.3	18170
3984. md+md2j=md7j+md	8.00E+01	3.3	18170
3985. md+md2j=md6j+md	8.00E+01	3.3	18170
3986. md+md2j=md5j+md	8.00E+01	3.3	18170
3987. md+md2j=md4j+md	8.00E+01	3.3	18170
3988. md+md2j=mdmj+md	1.20E+02	3.3	19840
3989. md+md10oo=md10j+md10ooh	2.80E+12	0.0	20440
3990. md+md10oo=md9j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3991. md+md10oo=md8j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3992. md+md10oo=md7j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3993. md+md10oo=md6j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3994. md+md10oo=md5j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3995. md+md10oo=md4j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3996. md+md10oo=md3j+md10ooh	1.87E+12	0.0	17690
3997. md+md10oo=md2j+md10ooh	1.00E+12	0.0	14550
3998. md+md10oo=mdmj+md10ooh	2.80E+12	0.0	20440
3999. md+md9oo=md10j+md9ooh	2.80E+12	0.0	20440
4000. md+md9oo=md9j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4001. md+md9oo=md8j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4002. md+md9oo=md7j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4003. md+md9oo=md6j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4004. md+md9oo=md5j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4005. md+md9oo=md4j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4006. md+md9oo=md3j+md9ooh	1.87E+12	0.0	17690
4007. md+md9oo=md2j+md9ooh	1.00E+12	0.0	14550
4008. md+md9oo=mdmj+md9ooh	2.80E+12	0.0	20440
4009. md+md8oo=md10j+md8ooh	2.80E+12	0.0	20440
4010. md+md8oo=md9j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4011. md+md8oo=md8j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4012. md+md8oo=md7j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4013. md+md8oo=md6j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4014. md+md8oo=md5j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4015. md+md8oo=md4j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4016. md+md8oo=md3j+md8ooh	1.87E+12	0.0	17690
4017. md+md8oo=md2j+md8ooh	1.00E+12	0.0	14550
4018. md+md8oo=mdmj+md8ooh	2.80E+12	0.0	20440
4019. md+md7oo=md10j+md7ooh	2.80E+12	0.0	20440
4020. md+md7oo=md9j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4021. md+md7oo=md8j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4022. md+md7oo=md7j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4023. md+md7oo=md6j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4024. md+md7oo=md5j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4025. md+md7oo=md4j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4026. md+md7oo=md3j+md7ooh	1.87E+12	0.0	17690
4027. md+md7oo=md2j+md7ooh	1.00E+12	0.0	14550
4028. md+md7oo=mdmj+md7ooh	2.80E+12	0.0	20440
4029. md+md6oo=md10j+md6ooh	2.80E+12	0.0	20440
4030. md+md6oo=md9j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690

4031. md+md6oo=md8j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4032. md+md6oo=md7j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4033. md+md6oo=md6j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4034. md+md6oo=md5j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4035. md+md6oo=md4j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4036. md+md6oo=md3j+md6ooh	1.87E+12	0.0	17690
4037. md+md6oo=md2j+md6ooh	1.00E+12	0.0	14550
4038. md+md6oo=mdmj+md6ooh	2.80E+12	0.0	20440
4039. md+md5oo=md10j+md5ooh	2.80E+12	0.0	20440
4040. md+md5oo=md9j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4041. md+md5oo=md8j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4042. md+md5oo=md7j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4043. md+md5oo=md6j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4044. md+md5oo=md5j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4045. md+md5oo=md4j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4046. md+md5oo=md3j+md5ooh	1.87E+12	0.0	17690
4047. md+md5oo=md2j+md5ooh	1.00E+12	0.0	14550
4048. md+md5oo=mdmj+md5ooh	2.80E+12	0.0	20440
4049. md+md4oo=md10j+md4ooh	2.80E+12	0.0	20440
4050. md+md4oo=md9j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4051. md+md4oo=md8j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4052. md+md4oo=md7j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4053. md+md4oo=md6j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4054. md+md4oo=md5j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4055. md+md4oo=md4j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4056. md+md4oo=md3j+md4ooh	1.87E+12	0.0	17690
4057. md+md4oo=md2j+md4ooh	1.00E+12	0.0	14550
4058. md+md4oo=mdmj+md4ooh	2.80E+12	0.0	20440
4059. md+md3oo=md10j+md3ooh	2.80E+12	0.0	20440
4060. md+md3oo=md9j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4061. md+md3oo=md8j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4062. md+md3oo=md7j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4063. md+md3oo=md6j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4064. md+md3oo=md5j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4065. md+md3oo=md4j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4066. md+md3oo=md3j+md3ooh	1.87E+12	0.0	17690
4067. md+md3oo=md2j+md3ooh	1.00E+12	0.0	14550
4068. md+md3oo=mdmj+md3ooh	2.80E+12	0.0	20440
4069. md+md2oo=md10j+md2ooh	2.80E+12	0.0	20440
4070. md+md2oo=md9j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4071. md+md2oo=md8j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4072. md+md2oo=md7j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4073. md+md2oo=md6j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4074. md+md2oo=md5j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4075. md+md2oo=md4j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4076. md+md2oo=md3j+md2ooh	1.87E+12	0.0	17690
4077. md+md2oo=md2j+md2ooh	1.00E+12	0.0	14550
4078. md+md2oo=mdmj+md2ooh	2.80E+12	0.0	20440
4079. md+mdmoo=md10j+mdmooh	2.80E+12	0.0	20440
4080. md+mdmoo=md9j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4081. md+mdmoo=md8j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4082. md+mdmoo=md7j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4083. md+mdmoo=md6j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4084. md+mdmoo=md5j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4085. md+mdmoo=md4j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4086. md+mdmoo=md3j+mdmooh	1.87E+12	0.0	17690
4087. md+mdmoo=md2j+mdmooh	1.00E+12	0.0	14550
4088. md+mdmoo=mdmj+mdmooh	2.80E+12	0.0	20440
4089. md10j=c2h4+mo8j	2.00E+13	0.0	28700
4090. md9j=c3h6+mhp7j	2.00E+13	0.0	28700
4091. md8j=c4h8-1+mhx6j	2.00E+13	0.0	28700
4092. md8j=ch3+mn8d	2.00E+13	0.0	31000
4093. md7j=c5h10-1+mpe5j	2.00E+13	0.0	28700
4094. md7j=c2h5+mo7d	2.00E+13	0.0	28700
4095. md6j=c6h12-1+mb4j	2.00E+13	0.0	28700
4096. md6j=nc3h7+mhp6d	2.00E+13	0.0	28700
4097. md5j=c7h14-1+mp3j	2.00E+13	0.0	28700
4098. md5j=pc4h9+mhx5d	2.00E+13	0.0	28700
4099. md4j=c8h16-1+me2j	2.00E+13	0.0	25700
4100. md4j=c5h11-1+mpe4d	2.00E+13	0.0	28700
4101. md3j=c9h18-1+ch3oco	2.00E+13	0.0	30500
4102. md3j=c6h13-1+mb3d	2.00E+13	0.0	28700
4103. md2j=c7h15-1+mp2d	2.00E+13	0.0	28700
4104. md2j=c9h18co+ch3o	1.46E+12	0.6	53276
4105. mdmj=ch2o+c9h19co	1.64E+22	-2.3	31950
4106. md10j=h+md9d	3.00E+13	0.0	38000
4107. md9j=h+md9d	3.00E+13	0.0	39000
4108. md9j=h+md8d	3.00E+13	0.0	38000
4109. md8j=h+md8d	3.00E+13	0.0	38000
4110. md8j=h+md7d	3.00E+13	0.0	38000
4111. md7j=h+md7d	3.00E+13	0.0	38000
4112. md7j=h+md6d	3.00E+13	0.0	38000
4113. md6j=h+md6d	3.00E+13	0.0	38000
4114. md6j=h+md5d	3.00E+13	0.0	38000
4115. md5j=h+md5d	3.00E+13	0.0	38000
4116. md5j=h+md4d	3.00E+13	0.0	38000
4117. md4j=h+md4d	3.00E+13	0.0	38000
4118. md4j=h+md3d	3.00E+13	0.0	38000
4119. md3j=h+md3d	3.00E+13	0.0	38000
4120. md3j=h+md2d	3.00E+13	0.0	38000
4121. md2j=h+md2d	3.00E+13	0.0	50500
4122. md10j=md7j	9.90E+07	1.0	17300
4123. md10j=md6j	1.70E+07	1.0	12000
4124. md10j=md5j	2.90E+06	1.0	17400
4125. md9j=md6j	9.90E+07	1.0	17300
Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	17300
4126. md9j=md5j	1.70E+07	1.0	12000
Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+07	1.0	12000
4127. md9j=md4j	2.90E+06	1.0	17400
Reverse Arrhenius coefficients:	2.90E+06	1.0	17400
4128. md8j=md5j	9.90E+07	1.0	17300
Reverse Arrhenius coefficients:	9.90E+07	1.0	17300
4129. md8j=md4j	1.70E+07	1.0	12000
Reverse Arrhenius coefficients:	1.70E+07	1.0	12000
4130. md8j=md3j	2.90E+06	1.0	17400
Reverse Arrhenius coefficients:	2.90E+06	1.0	17400
4131. md7j=>md4j	9.90E+07	1.0	17300
4132. md7j=>md3j	1.70E+07	1.0	12000
4133. md6j=>md3j	9.90E+07	1.0	17300
4134. md4j=>md7j	9.90E+07	1.0	17300
4135. md4j=mdmj	4.35E+06	1.0	24900
4136. md3j=>md7j	1.70E+07	1.0	12000
4137. md3j=>md6j	9.90E+07	1.0	17300
4138. md3j=mdmj	2.50E+07	1.0	19500
4139. md2j=md7j	2.90E+06	1.0	17400
4140. md2j=md6j	1.70E+07	1.0	12000
4141. md2j=md5j	9.90E+07	1.0	17300
4142. md2j=mdmj	1.50E+08	1.0	24800
4143. md10oo=md10ooh9j	9.90E+07	1.0	32500
4144. md10oo=md10ooh8j	1.70E+07	1.0	25000
4145. md10oo=md10ooh7j	2.90E+06	1.0	22000
4146. md10oo=md10ooh6j	5.16E+05	1.0	21000
4147. md9oo=md9ooh10j	1.50E+08	1.0	35500
4148. md9oo=md9ooh8j	9.90E+07	1.0	32500
4149. md9oo=md9ooh7j	1.70E+07	1.0	25000
4150. md9oo=md9ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
4151. md9oo=md9ooh5j	5.16E+05	1.0	21000
4152. md8oo=md8ooh10j	2.50E+07	1.0	28000
4153. md8oo=md8ooh9j	9.90E+07	1.0	32500
4154. md8oo=md8ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
4155. md8oo=md8ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
4156. md8oo=md8ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
4157. md8oo=md8ooh4j	5.16E+05	1.0	21000
4158. md7oo=md7ooh10j	4.35E+06	1.0	25000
4159. md7oo=md7ooh9j	1.70E+07	1.0	25000
4160. md7oo=md7ooh8j	9.90E+07	1.0	32500
4161. md7oo=md7ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
4162. md7oo=md7ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
4163. md7oo=md7ooh4j	2.90E+06	1.0	22000
4164. md7oo=md7ooh3j	5.16E+05	1.0	21000
4165. md6oo=md6ooh10j	7.74E+05	1.0	24000
4166. md6oo=md6ooh9j	2.90E+06	1.0	22000
4167. md6oo=md6ooh8j	1.70E+07	1.0	25000
4168. md6oo=md6ooh7j	9.90E+07	1.0	32500
4169. md6oo=md6ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
4170. md6oo=md6ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
4171. md6oo=md6ooh3j	2.90E+06	1.0	22000
4172. md6oo=md6ooh2j	5.16E+05	1.0	18000
4173. md5oo=md5ooh9j	5.16E+05	1.0	21000
4174. md5oo=md5ooh8j	2.90E+06	1.0	22000
4175. md5oo=md5ooh7j	1.70E+07	1.0	25000
4176. md5oo=md5ooh6j	9.90E+07	1.0	32500
4177. md5oo=md5ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
4178. md5oo=md5ooh3j	1.70E+07	1.0	25000
4179. md5oo=md5ooh2j	2.90E+06	1.0	19000
4180. md4oo=md4ooh8j	5.16E+05	1.0	21000
4181. md4oo=md4ooh7j	2.90E+06	1.0	22000
4182. md4oo=md4ooh6j	1.70E+07	1.0	25000
4183. md4oo=md4ooh5j	9.90E+07	1.0	32500
4184. md4oo=md4ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
4185. md4oo=md4ooh2j	1.70E+07	1.0	20000
4186. md3oo=md3ooh7j	5.16E+05	1.0	21000
4187. md3oo=md3ooh6j	2.90E+06	1.0	22000
4188. md3oo=md3ooh5j	1.70E+07	1.0	25000
4189. md3oo=md3ooh4j	9.90E+07	1.0	32500
4190. md3oo=md3ooh2j	9.90E+07	1.0	29500
4191. md2oo=md2ooh6j	5.16E+05	1.0	21000
4192. md2oo=md2ooh5j	2.90E+06	1.0	22000
4193. md2oo=md2ooh4j	1.70E+07	1.0	25000
4194. md2oo=md2ooh3j	9.90E+07	1.0	32500
4195. md2oo=md2oohmj	4.35E+06	1.0	28500
4196. mdmoo=mdmooh2j	2.90E+06	1.0	21700
4197. md10j+o2=md9d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4198. md9j+o2=md9d+ho2	8.07E+11	0.0	5000
4199. md9j+o2=md8d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4200. md8j+o2=md8d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4201. md8j+o2=md7d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4202. md7j+o2=md7d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4203. md7j+o2=md6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4204. md6j+o2=md6d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4205. md6j+o2=md5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4206. md5j+o2=md5d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4207. md5j+o2=md4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4208. md4j+o2=md4d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4209. md4j+o2=md3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4210. md3j+o2=md3d+ho2	1.95E+12	0.0	5000
4211. md3j+o2=md2d+ho2	2.60E+11	0.0	2500
4212. md2j+o2=md2d+ho2	1.58E+12	0.0	15200
4213. md10j+o2=md10oo	9.00E+18	-2.5	0
4214. md9j+o2=md9oo	1.70E+19	-2.5	0
4215. md8j+o2=md8oo	1.80E+19	-2.5	0
4216. md7j+o2=md7oo	1.80E+19	-2.5	0
4217. md6j+o2=md6oo	1.80E+19	-2.5	0
4218. md5j+o2=md5oo	1.80E+19	-2.5	0
4219. md4j+o2=md4oo	1.80E+19	-2.5	0
4220. md3j+o2=md3oo	1.05E+19	-2.5	0
4221. md2j+o2=md2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4222. mdmj+o2=mdmoo	3.50E+11	0.0	-1700
4223. md10ooh9j+o2=md10ooh9oo	1.80E+19	-2.5	0
4224. md10ooh8j+o2=md10ooh8oo	1.80E+19	-2.5	0
4225. md10ooh7j+o2=md10ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
4226. md10ooh6j+o2=md10ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4227. md9ooh10j+o2=md9ooh10oo	1.50E+18	-2.5	0
4228. md9ooh8j+o2=md9ooh8oo	1.05E+19	-2.5	0
4229. md9ooh7j+o2=md9ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
4230. md9ooh6j+o2=md9ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4231. md9ooh5j+o2=md9ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
4232. md8ooh10j+o2=md8ooh10oo	9.00E+18	-2.5	0
4233. md8ooh9j+o2=md8ooh9oo	9.50E+18	-2.5	0
4234. md8ooh7j+o2=md8ooh7oo	1.05E+19	-2.5	0
4235. md8ooh6j+o2=md8ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4236. md8ooh5j+o2=md8ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
4237. md8ooh4j+o2=md8ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
4238. md7ooh10j+o2=md7ooh10oo	9.00E+18	-2.5	0
4239. md7ooh9j+o2=md7ooh9oo	1.70E+19	-2.5	0
4240. md7ooh8j+o2=md7ooh8oo	1.05E+19	-2.5	0
4241. md7ooh6j+o2=md7ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
4242. md7ooh5j+o2=md7ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
4243. md7ooh4j+o2=md7ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
4244. md7ooh3j+o2=md7ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
4245. md6ooh10j+o2=md6ooh10oo	9.00E+18	-2.5	0
4246. md6ooh9j+o2=md6ooh9oo	1.70E+19	-2.5	0
4247. md6ooh8j+o2=md6ooh8oo	1.80E+19	-2.5	0
4248. md6ooh7j+o2=md6ooh7oo	1.05E+19	-2.5	0
4249. md6ooh5j+o2=md6ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
4250. md6ooh4j+o2=md6ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
4251. md6ooh3j+o2=md6ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
4252. md6ooh2j+o2=md6ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4253. md5ooh9j+o2=md5ooh9oo	1.70E+19	-2.5	0
4254. md5ooh8j+o2=md5ooh8oo	1.80E+19	-2.5	0
4255. md5ooh7j+o2=md5ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
4256. md5ooh6j+o2=md5ooh6oo	1.05E+19	-2.5	0
4257. md5ooh4j+o2=md5ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
4258. md5ooh3j+o2=md5ooh3oo	1.05E+19	-2.5	0
4259. md5ooh2j+o2=md5ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4260. md4ooh8j+o2=md4ooh8oo	1.80E+19	-2.5	0
4261. md4ooh7j+o2=md4ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
4262. md4ooh6j+o2=md4ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4263. md4ooh5j+o2=md4ooh5oo	1.05E+19	-2.5	0
4264. md4ooh3j+o2=md4ooh3oo	3.00E+18	-2.5	0
4265. md4ooh2j+o2=md4ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4266. md3ooh7j+o2=md3ooh7oo	1.80E+19	-2.5	0
4267. md3ooh6j+o2=md3ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4268. md3ooh5j+o2=md3ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
4269. md3ooh4j+o2=md3ooh4oo	1.05E+19	-2.5	0
4270. md3ooh2j+o2=md3ooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4271. md2ooh6j+o2=md2ooh6oo	1.80E+19	-2.5	0
4272. md2ooh5j+o2=md2ooh5oo	1.80E+19	-2.5	0
4273. md2ooh4j+o2=md2ooh4oo	1.80E+19	-2.5	0
4274. md2ooh3j+o2=md2ooh3oo	1.00E+19	-2.5	0
4275. md2oohmj+o2=md2oohmoo	3.50E+11	0.0	-1700
4276. mdmooh2j+o2=mdmooh2oo	1.20E+10	0.0	-2300
4277. md10oo+md10j=md10o+md10o	7.00E+12	0.0	-1000
4278. md10oo+md9j=md9o+md9o	7.00E+12	0.0	-1000
4279. md10oo+md8j=md9o+md8o	7.00E+12	0.0	-1000
4280. md10oo+md7j=md9o+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4281. md10oo+md6j=md9o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4282. md10oo+md5j=md9o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4283. md10oo+md4j=md9o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4284. md10oo+md3j=md9o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4285. md10oo+md2j=md9o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4286. md10oo+mdmj=md9o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4287. md9oo+md9j=md9o+md9o	7.00E+12	0.0	-1000
4288. md9oo+md8j=md9o+md8o	7.00E+12	0.0	-1000
4289. md9oo+md7j=md9o+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4290. md9oo+md6j=md9o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4291. md9oo+md5j=md9o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4292. md9oo+md4j=md9o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4293. md9oo+md3j=md9o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4294. md9oo+md2j=md9o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4295. md9oo+mdmj=md9o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4296. md8oo+md8j=md8o+md8o	7.00E+12	0.0	-1000
4297. md8oo+md7j=md8o+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4298. md8oo+md6j=md8o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4299. md8oo+md5j=md8o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4300. md8oo+md4j=md8o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4301. md8oo+md3j=md8o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4302. md8oo+md2j=md8o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4303. md8oo+mdmj=md8o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4304. md7oo+md7j=md7o+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4305. md7oo+md6j=md7o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4306. md7oo+md5j=md7o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4307. md7oo+md4j=md7o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4308. md7oo+md3j=md7o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4309. md7oo+md2j=md7o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4310. md7oo+mdmj=md7o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4311. md6oo+md6j=md6o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4312. md6oo+md5j=md6o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4313. md6oo+md4j=md6o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4314. md6oo+md3j=md6o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4315. md6oo+md2j=md6o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4316. md6oo+mdmj=md6o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4317. md5oo+md5j=md5o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4318. md5oo+md4j=md5o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4319. md5oo+md3j=md5o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4320. md5oo+md2j=md5o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4321. md5oo+mdmj=md5o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4322. md4oo+md4j=md4o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4323. md4oo+md3j=md4o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4324. md4oo+md2j=md4o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4325. md4oo+mdmj=md4o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4326. md3oo+md3j=md3o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4327. md3oo+md2j=md3o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4328. md3oo+mdmj=md3o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4329. md2oo+md2j=md2o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4330. md2oo+mdmj=md2o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4331. mdmoo+mdmj=mdmo+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4332. ho2+md10j=oh+md10o	7.00E+12	0.0	-1000
4333. ho2+md9j=oh+md9o	7.00E+12	0.0	-1000
4334. ho2+md8j=oh+md8o	7.00E+12	0.0	-1000
4335. ho2+md7j=oh+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4336. ho2+md6j=oh+md6o	7.00E+12	0.0	-1000

4337.	ho2+md5j=oh+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4338.	ho2+md4j=oh+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4339.	ho2+md3j=oh+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4340.	ho2+md2j=oh+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4341.	ho2+mdmj=oh+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4342.	md10oo+ch3=md10o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4343.	md9oo+ch3=md9o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4344.	md8oo+ch3=md8o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4345.	md7oo+ch3=md7o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4346.	md6oo+ch3=md6o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4347.	md5oo+ch3=md5o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4348.	md4oo+ch3=md4o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4349.	md3oo+ch3=md3o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4350.	md2oo+ch3=md2o+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4351.	mdmoo+ch3=mdmo+ch3o	7.00E+12	0.0	-1000
4352.	ch3o2+md10j=ch3o+md10o	7.00E+12	0.0	-1000
4353.	ch3o2+md9j=ch3o+md9o	7.00E+12	0.0	-1000
4354.	ch3o2+md8j=ch3o+md8o	7.00E+12	0.0	-1000
4355.	ch3o2+md7j=ch3o+md7o	7.00E+12	0.0	-1000
4356.	ch3o2+md6j=ch3o+md6o	7.00E+12	0.0	-1000
4357.	ch3o2+md5j=ch3o+md5o	7.00E+12	0.0	-1000
4358.	ch3o2+md4j=ch3o+md4o	7.00E+12	0.0	-1000
4359.	ch3o2+md3j=ch3o+md3o	7.00E+12	0.0	-1000
4360.	ch3o2+md2j=ch3o+md2o	7.00E+12	0.0	-1000
4361.	ch3o2+mdmj=ch3o+mdmo	7.00E+12	0.0	-1000
4362.	md10oo+ho2=md10ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4363.	md9oo+ho2=md9ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4364.	md8oo+ho2=md8ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4365.	md7oo+ho2=md7ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4366.	md6oo+ho2=md6ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4367.	md5oo+ho2=md5ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4368.	md4oo+ho2=md4ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4369.	md3oo+ho2=md3ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4370.	md2oo+ho2=md2ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4371.	mdmoo+ho2=mdmooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
4372.	md10oo+h2o2=>md10ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4373.	md9oo+h2o2=>md9ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4374.	md8oo+h2o2=>md8ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4375.	md7oo+h2o2=>md7ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4376.	md6oo+h2o2=>md6ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4377.	md5oo+h2o2=>md5ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4378.	md4oo+h2o2=>md4ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4379.	md3oo+h2o2=>md3ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4380.	md2oo+h2o2=>md2ooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4381.	mdmoo+h2o2=>mdmooh+ho2	2.40E+12	0.0	10000
4382.	md10ooh+ho2=>md10oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4383.	md9ooh+ho2=>md9oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4384.	md8ooh+ho2=>md8oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4385.	md7ooh+ho2=>md7oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4386.	md6ooh+ho2=>md6oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4387.	md5ooh+ho2=>md5oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4388.	md4ooh+ho2=>md4oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4389.	md3ooh+ho2=>md3oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4390.	md2ooh+ho2=>md2oo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4391.	mdmooh+ho2=>mdmoo+h2o2	2.40E+12	0.0	10000
4392.	md10oo+md10oo=>md10o+md10o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4393.	md10oo+md9oo=>md10o+md9o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4394.	md10oo+md8oo=>md10o+md8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4395.	md10oo+md7oo=>md10o+md7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4396.	md10oo+md6oo=>md10o+md6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4397.	md10oo+md5oo=>md10o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4398.	md10oo+md4oo=>md10o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4399.	md10oo+md3oo=>md10o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4400.	md10oo+md2oo=>md10o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4401.	md10oo+mdmoo=>md10o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4402.	md9oo+md9oo=>md9o+md9o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4403.	md9oo+md8oo=>md9o+md8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4404.	md9oo+md7oo=>md8o+md7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4405.	md9oo+md6oo=>md8o+md6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4406.	md9oo+md5oo=>md8o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4407.	md9oo+md4oo=>md8o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4408.	md9oo+md3oo=>md8o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4409.	md9oo+md2oo=>md8o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4410.	md9oo+mdmoo=>md8o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4411.	md8oo+md8oo=>md8o+md8o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4412.	md8oo+md7oo=>md8o+md7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4413.	md8oo+md6oo=>md8o+md6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4414.	md8oo+md5oo=>md8o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4415.	md8oo+md4oo=>md8o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4416.	md8oo+md3oo=>md8o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4417.	md8oo+md2oo=>md8o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4418.	md8oo+mdmoo=>md8o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4419.	md7oo+md7oo=>md7o+md7o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4420.	md7oo+md6oo=>md7o+md6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4421.	md7oo+md5oo=>md7o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4422.	md7oo+md4oo=>md7o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4423.	md7oo+md3oo=>md7o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4424.	md7oo+md2oo=>md7o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4425.	md7oo+mdmoo=>md7o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4426.	md6oo+md6oo=>md6o+md6o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4427.	md6oo+md5oo=>md6o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4428.	md6oo+md4oo=>md6o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4429.	md6oo+md3oo=>md6o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4430.	md6oo+md2oo=>md6o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4431.	md6oo+mdmoo=>md6o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4432.	md5oo+md5oo=>md5o+md5o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4433.	md5oo+md4oo=>md5o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4434.	md5oo+md3oo=>md5o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4435.	md5oo+md2oo=>md5o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4436.	md5oo+mdmoo=>md5o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4437.	md4oo+md4oo=>md4o+md4o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4438.	md4oo+md3oo=>md4o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4439.	md4oo+md2oo=>md4o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4440.	md4oo+mdmoo=>md4o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4441.	md3oo+md3oo=>md3o+md3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4442.	md3oo+md2oo=>md3o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4443.	md3oo+mdmoo=>md3o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4444.	md2oo+md2oo=>md2o+md2o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4445.	md2oo+mdmoo=>md2o+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4446.	mdmoo+mdmoo=>mdmo+mdmo+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4447.	md10oo+ch3o2=>md10o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4448.	md9oo+ch3o2=>md9o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4449.	md8oo+ch3o2=>md8o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4450.	md7oo+ch3o2=>md7o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4451.	md6oo+ch3o2=>md6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4452.	md5oo+ch3o2=>md5o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4453.	md4oo+ch3o2=>md4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4454.	md3oo+ch3o2=>md3o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4455.	md2oo+ch3o2=>md2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4456.	mdmoo+ch3o2=>mdmo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
4457.	md10ooh=md10o+oh	1.50E+16	0.0	42500
4458.	md9ooh=md9o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4459.	md8ooh=md8o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4460.	md7ooh=md7o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4461.	md6ooh=md6o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4462.	md5ooh=md5o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4463.	md4ooh=md4o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4464.	md3ooh=md3o+oh	9.45E+15	0.0	41600
4465.	md2ooh=md2o+oh	5.95E+15	0.0	42540
4466.	mdmooh=mdmo+oh	1.50E+16	0.0	42500
4467.	ch2o+mn9j=md10o	1.50E+11	0.0	11900
4468.	ch3cho+mo8j=md9o	1.50E+11	0.0	11900
4469.	ch3+mn9*o=md9o	1.50E+11	0.0	11900
4470.	c2h5cho+mhp7j=md8o	1.50E+11	0.0	11900
4471.	c2h5+mo8*o=md8o	1.50E+11	0.0	11900
4472.	nc3h7cho+mhx6j=md7o	1.50E+11	0.0	11900
4473.	nc3h7+mhp7*o=md7o	1.50E+11	0.0	11900
4474.	nc4h9cho+mpe5j=md6o	1.50E+11	0.0	11900
4475.	pc4h9+mhx6*o=md6o	1.50E+11	0.0	11900
4476.	c5h11cho+mb4j=md5o	1.50E+11	0.0	11900
4477.	c5h11-1+mpe5*o=md5o	1.50E+11	0.0	11900
4478.	c6h13cho+mp3j=md4o	1.50E+11	0.0	11900
4479.	c6h13-1+mb4*o=md4o	1.50E+11	0.0	11900
4480.	c7h15cho+me2j=md3o	1.50E+11	0.0	11900
4481.	c7h15-1+mp3*o=md3o	1.50E+11	0.0	11900
4482.	c8h17cho+ch3oco=md2o	1.50E+11	0.0	11900
4483.	c8h17-1+me2*o=md2o	1.50E+11	0.0	11900
4484.	ch2o+daoj=mdmo	1.50E+11	0.0	11900
4485.	md10*o+h=md10o	6.63E+09	1.1	4226
4486.	mdm*o+h=mdmo	6.63E+09	1.1	4226
4487.	md10ooh8j=>mdcy10o8+oh	2.04E+11	0.0	19500
4488.	md10ooh7j=>mdcy10o7+oh	3.63E+10	0.0	13000
4489.	md10ooh6j=>mdcy10o6+oh	5.15E+06	0.0	1950
4490.	md9ooh7j=>mdcy9o7+oh	2.04E+11	0.0	19500
4491.	md9ooh6j=>mdcy9o6+oh	3.63E+10	0.0	13000
4492.	md9ooh5j=>mdcy9o5+oh	5.15E+06	0.0	1950
4493.	md8ooh10j=>mdcy10o8+oh	4.47E+11	0.0	21900
4494.	md8ooh6j=>mdcy8o6+oh	2.04E+11	0.0	19500
4495.	md8ooh5j=>mdcy8o5+oh	3.63E+10	0.0	13000
4496.	md8ooh4j=>mdcy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
4497.	md7ooh10j=>mdcy10o7+oh	5.13E+10	0.0	14800
4498.	md7ooh9j=>mdcy9o7+oh	2.04E+11	0.0	19500
4499.	md7ooh5j=>mdcy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
4500.	md7ooh4j=>mdcy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
4501.	md6ooh10j=>mdcy10o6+oh	5.15E+06	0.0	1950
4502.	md6ooh9j=>mdcy9o6+oh	3.63E+10	0.0	13000
4503.	md6ooh8j=>mdcy8o6+oh	2.04E+11	0.0	19500
4504.	md6ooh4j=>mdcy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
4505.	md6ooh3j=>mdcy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
4506.	md6ooh2j=>mdcy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
4507.	md5ooh9j=>mdcy9o5+oh	5.15E+06	0.0	1950
4508.	md5ooh8j=>mdcy8o5+oh	3.63E+10	0.0	13000
4509.	md5ooh7j=>mdcy7o5+oh	2.04E+11	0.0	19500
4510.	md5ooh3j=>mdcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
4511.	md5ooh2j=>mdcy5o2+oh	2.57E+10	0.0	11500
4512.	md4ooh8j=>mdcy8o4+oh	5.15E+06	0.0	1950
4513.	md4ooh7j=>mdcy7o4+oh	3.63E+10	0.0	13000
4514.	md4ooh6j=>mdcy6o4+oh	2.04E+11	0.0	19500
4515.	md4ooh2j=>mdcy4o2+oh	3.31E+11	0.0	17400
4516.	md3ooh7j=>mdcy7o3+oh	5.15E+06	0.0	1950
4517.	md3ooh6j=>mdcy6o3+oh	3.63E+10	0.0	13000
4518.	md3ooh5j=>mdcy5o3+oh	2.04E+11	0.0	19500
4519.	md2ooh6j=>mdcy6o2+oh	5.15E+06	0.0	1950
4520.	md2ooh5j=>mdcy5o2+oh	3.63E+10	0.0	13000
4521.	md2ooh4j=>mdcy4o2+oh	2.04E+11	0.0	19500
4522.	md2oohmj=>mdcy2om+oh	5.13E+10	0.0	14800
4523.	mdmooh2j=>mdcy2om+oh	2.57E+10	0.0	11500
4524.	mdcy10o8+h=>h2+c2h4+mo8j*o	2.40E+08	1.5	2005
4525.	mdcy10o8+h=>h2+hco+mn8d	4.80E+08	1.5	2785
4526.	mdcy10o7+h=>h2+c2h4+mo8j7*o	2.40E+08	1.5	2005
4527.	mdcy10o7+h=>h2+mo7d+ch2cho	4.80E+08	1.5	2785
4528.	mdcy10o6+h=>h2+c2h4+mo8j6*o	2.40E+08	1.5	2005
4529.	mdcy10o6+h=>h2+c2h4cho+mhp6d	4.80E+08	1.5	2785
4530.	mdcy9o7+h=>h2+c3h6+mhp7j*o	2.40E+08	1.5	2005
4531.	mdcy9o7+h=>h2+mo7d+ch3co	2.40E+08	1.5	2005
4532.	mdcy9o6+h=>h2+c3h6+mhp7j6*o	2.40E+08	1.5	2005
4533.	mdcy9o6+h=>h2+mhp6d+ch3coch2	2.40E+08	1.5	2005
4534.	mdcy9o5+h=>h2+c3h6+mhp7j5*o	2.40E+08	1.5	2005
4535.	mdcy9o5+h=>h2+mhx5d+acetoch2	2.40E+08	1.5	2005
4536.	mdcy8o6+h=>h2+c4h8-1+mhx6j*o	2.40E+08	1.5	2005
4537.	mdcy8o6+h=>h2+mhp6d+c2h5co	2.40E+08	1.5	2005
4538.	mdcy8o5+h=>h2+c4h8-1+mhx6j5*o	2.40E+08	1.5	2005
4539.	mdcy8o5+h=>h2+mhx5d+c2h5coch2	2.40E+08	1.5	2005
4540.	mdcy8o4+h=>h2+c4h8-1+mhx6j4*o	2.40E+08	1.5	2005
4541.	mdcy8o4+h=>h2+mpe4d+etcoetp	2.40E+08	1.5	2005
4542.	mdcy7o5+h=>h2+c5h10-1+mpe5j*o	2.40E+08	1.5	2005
4543.	mdcy7o5+h=>h2+mhx5d+nc3h7co	2.40E+08	1.5	2005
4544.	mdcy7o4+h=>h2+c5h10-1+mpe5j4*o	2.40E+08	1.5	2005
4545.	mdcy7o4+h=>h2+mpe4d+nc3h7coch2	2.40E+08	1.5	2005
4546.	mdcy7o3+h=>h2+c5h10-1+mpe5j3*o	2.40E+08	1.5	2005
4547.	mdcy7o3+h=>h2+mb3d+nprcoetp	2.40E+08	1.5	2005
4548.	mdcy6o4+h=>h2+c6h12-1+mb4j*o	2.40E+08	1.5	2005
4549.	mdcy6o4+h=>h2+mpe4d+nc4h9co	2.40E+08	1.5	2005
4550.	mdcy6o3+h=>h2+c6h12-1+mb4j3*o	2.40E+08	1.5	2005
4551.	mdcy6o3+h=>h2+mb3d+nc4h9coch2	2.40E+08	1.5	2005
4552.	mdcy6o2+h=>h2+mp2d+nc4h9coc2h4p	9.60E+08	1.5	2005
4553.	mdcy5o3+h=>h2+c7h14-1+mp3j*o	2.40E+08	1.5	2005
4554.	mdcy5o3+h=>h2+mb3d+c5h11co	2.40E+08	1.5	2005
4555.	mdcy5o2+h=>h2+mp2d+nc5h11coch2	9.60E+08	1.5	2005
4556.	mdcy4o2+h=>h2+mp2d+c6h13co	9.60E+08	1.5	2005
4557.	mdcy2om+h=>h2+c9h18co+ocho	4.80E+08	1.5	2785
4558.	mdcy10o8+oh=>h2o+c2h4+mo8j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4559.	mdcy10o8+oh=>h2o+hco+mn8d	2.40E+06	2.0	-1192
4560.	mdcy10o7+oh=>h2o+c2h4+mo8j7*o	1.20E+06	2.0	-1192
4561.	mdcy10o7+oh=>h2o+mo7d+ch2cho	2.40E+06	2.0	-1192
4562.	mdcy10o6+oh=>h2o+c2h4+mo8j6*o	1.20E+06	2.0	-1192
4563.	mdcy10o6+oh=>h2o+c2h4cho+mhp6d	2.40E+06	2.0	-1192
4564.	mdcy9o7+oh=>h2o+c3h6+mhp7j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4565.	mdcy9o7+oh=>h2o+mo7d+ch3co	1.20E+06	2.0	-1192
4566.	mdcy9o6+oh=>h2o+c3h6+mhp7j6*o	1.20E+06	2.0	-1192
4567.	mdcy9o6+oh=>h2o+mhp6d+ch3coch2	1.20E+06	2.0	-1192
4568.	mdcy9o5+oh=>h2o+c3h6+mhp7j5*o	1.20E+06	2.0	-1192
4569.	mdcy9o5+oh=>h2o+mhx5d+acetoch2	1.20E+06	2.0	-1192
4570.	mdcy8o6+oh=>h2o+c4h8-1+mhx6j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4571.	mdcy8o6+oh=>h2o+mhp6d+c2h5co	1.20E+06	2.0	-1192
4572.	mdcy8o5+oh=>h2o+c4h8-1+mhx6j5*o	1.20E+06	2.0	-1192
4573.	mdcy8o5+oh=>h2o+mhx5d+c2h5coch2	1.20E+06	2.0	-1192
4574.	mdcy8o4+oh=>h2o+c4h8-1+mhx6j4*o	1.20E+06	2.0	-1192
4575.	mdcy8o4+oh=>h2o+mpe4d+etcoetp	1.20E+06	2.0	-1192
4576.	mdcy7o5+oh=>h2o+c5h10-1+mpe5j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4577.	mdcy7o5+oh=>h2o+mhx5d+nc3h7co	1.20E+06	2.0	-1192
4578.	mdcy7o4+oh=>h2o+c5h10-1+mpe5j4*o	1.20E+06	2.0	-1192
4579.	mdcy7o4+oh=>h2o+mpe4d+nc3h7coch2	1.20E+06	2.0	-1192
4580.	mdcy7o3+oh=>h2o+c5h10-1+mpe5j3*o	1.20E+06	2.0	-1192
4581.	mdcy7o3+oh=>h2o+mb3d+nprcoetp	1.20E+06	2.0	-1192
4582.	mdcy6o4+oh=>h2o+c6h12-1+mb4j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4583.	mdcy6o4+oh=>h2o+mpe4d+nc4h9co	1.20E+06	2.0	-1192
4584.	mdcy6o3+oh=>h2o+c6h12-1+mb4j3*o	1.20E+06	2.0	-1192
4585.	mdcy6o3+oh=>h2o+mb3d+nc4h9coch2	1.20E+06	2.0	-1192
4586.	mdcy6o2+oh=>h2o+mp2d+nc4h9coc2h4p	4.80E+06	2.0	-1192
4587.	mdcy5o3+oh=>h2o+c7h14-1+mp3j*o	1.20E+06	2.0	-1192
4588.	mdcy5o3+oh=>h2o+mb3d+c5h11co	1.20E+06	2.0	-1192
4589.	mdcy5o2+oh=>h2o+mp2d+nc5h11coch2	4.80E+06	2.0	-1192
4590.	mdcy4o2+oh=>h2o+mp2d+c6h13co	4.80E+06	2.0	-1192
4591.	mdcy2om+oh=>h2o+c9h18co+ocho	2.40E+06	2.0	-1192
4592.	mdcy10o8+ho2=>h2o2+c2h4+mo8j*o	2.00E+12	0.0	13260
4593.	mdcy10o8+ho2=>h2o2+hco+mn8d	4.00E+12	0.0	14400
4594.	mdcy10o7+ho2=>h2o2+c2h4+mo8j7*o	2.00E+12	0.0	13260
4595.	mdcy10o7+ho2=>h2o2+mo7d+ch2cho	4.00E+12	0.0	14400
4596.	mdcy10o6+ho2=>h2o2+c2h4+mo8j6*o	2.00E+12	0.0	13260
4597.	mdcy10o6+ho2=>h2o2+c2h4cho+mhp6d	4.00E+12	0.0	14400
4598.	mdcy9o7+ho2=>h2o2+c3h6+mhp7j*o	2.00E+12	0.0	13260
4599.	mdcy9o7+ho2=>h2o2+mo7d+ch3co	2.00E+12	0.0	13260
4600.	mdcy9o6+ho2=>h2o2+c3h6+mhp7j6*o	2.00E+12	0.0	13260
4601.	mdcy9o6+ho2=>h2o2+mhp6d+ch3coch2	2.00E+12	0.0	13260
4602.	mdcy9o5+ho2=>h2o2+c3h6+mhp7j5*o	2.00E+12	0.0	13260
4603.	mdcy9o5+ho2=>h2o2+mhx5d+acetoch2	2.00E+12	0.0	13260
4604.	mdcy8o6+ho2=>h2o2+c4h8-1+mhx6j*o	2.00E+12	0.0	13260
4605.	mdcy8o6+ho2=>h2o2+mhp6d+c2h5co	2.00E+12	0.0	13260
4606.	mdcy8o5+ho2=>h2o2+c4h8-1+mhx6j5*o	2.00E+12	0.0	13260
4607.	mdcy8o5+ho2=>h2o2+mhx5d+c2h5coch2	2.00E+12	0.0	13260
4608.	mdcy8o4+ho2=>h2o2+c4h8-1+mhx6j4*o	2.00E+12	0.0	13260
4609.	mdcy8o4+ho2=>h2o2+mpe4d+etcoetp	2.00E+12	0.0	13260
4610.	mdcy7o5+ho2=>h2o2+c5h10-1+mpe5j*o	2.00E+12	0.0	13260
4611.	mdcy7o5+ho2=>h2o2+mhx5d+nc3h7co	2.00E+12	0.0	13260
4612.	mdcy7o4+ho2=>h2o2+c5h10-1+mpe5j4*o	2.00E+12	0.0	13260
4613.	mdcy7o4+ho2=>h2o2+mpe4d+nc3h7coch2	2.00E+12	0.0	13260
4614.	mdcy7o3+ho2=>h2o2+c5h10-1+mpe5j3*o	2.00E+12	0.0	13260
4615.	mdcy7o3+ho2=>h2o2+mb3d+nprcoetp	2.00E+12	0.0	13260
4616.	mdcy6o4+ho2=>h2o2+c6h12-1+mb4j*o	2.00E+12	0.0	13260
4617.	mdcy6o4+ho2=>h2o2+mpe4d+nc4h9co	2.00E+12	0.0	13260
4618.	mdcy6o3+ho2=>h2o2+c6h12-1+mb4j3*o	2.00E+12	0.0	13260
4619.	mdcy6o3+ho2=>h2o2+mb3d+nc4h9coch2	2.00E+12	0.0	13260
4620.	mdcy6o2+ho2=>h2o2+mp2d+nc4h9coc2h4p	8.00E+12	0.0	13260
4621.	mdcy5o3+ho2=>h2o2+c7h14-1+mp3j*o	2.00E+12	0.0	13260
4622.	mdcy5o3+ho2=>h2o2+mb3d+c5h11co	2.00E+12	0.0	13260
4623.	mdcy5o2+ho2=>h2o2+mp2d+nc5h11coch2	8.00E+12	0.0	13260
4624.	mdcy4o2+ho2=>h2o2+mp2d+c6h13co	8.00E+12	0.0	13260
4625.	mdcy2om+ho2=>h2o2+c9h18co+ocho	4.00E+12	0.0	14400
4626.	mdcy10o8+ch3o=>ch3oh+c2h4+mo8j*o	1.10E+11	0.0	5000
4627.	mdcy10o8+ch3o=>ch3oh+hco+mn8d	2.19E+11	0.0	5000
4628.	mdcy10o7+ch3o=>ch3oh+c2h4+mo8j7*o	1.10E+11	0.0	5000
4629.	mdcy10o7+ch3o=>ch3oh+mo7d+ch2cho	2.19E+11	0.0	5000
4630.	mdcy10o6+ch3o=>ch3oh+c2h4+mo8j6*o	1.10E+11	0.0	5000
4631.	mdcy10o6+ch3o=>ch3oh+c2h4cho+mhp6d	4.00E+12	0.0	14400
4632.	mdcy9o7+ch3o=>ch3oh+c3h6+mhp7j*o	1.10E+11	0.0	5000
4633.	mdcy9o7+ch3o=>ch3oh+mo7d+ch3co	1.10E+11	0.0	5000
4634.	mdcy9o6+ch3o=>ch3oh+c3h6+mhp7j6*o	1.10E+11	0.0	5000
4635.	mdcy9o6+ch3o=>ch3oh+mhp6d+ch3coch2	1.10E+11	0.0	5000
4636.	mdcy9o5+ch3o=>ch3oh+c3h6+mhp7j5*o	1.10E+11	0.0	5000
4637.	mdcy9o5+ch3o=>ch3oh+mhx5d+acetoch2	1.10E+11	0.0	5000
4638.	mdcy8o6+ch3o=>ch3oh+c4h8-1+mhx6j*o	1.10E+11	0.0	5000
4639.	mdcy8o6+ch3o=>ch3oh+mhp6d+c2h5co	1.10E+11	0.0	5000
4640.	mdcy8o5+ch3o=>ch3oh+c4h8-1+mhx6j5*o	1.10E+11	0.0	5000
4641.	mdcy8o5+ch3o=>ch3oh+mhx5d+c2h5coch2	1.10E+11	0.0	5000
4642.	mdcy8o4+ch3o=>ch3oh+c4h8-1+mhx6j4*o	1.10E+11	0.0	5000
4643.	mdcy8o4+ch3o=>ch3oh+mpe4d+etcoetp	1.10E+11	0.0	5000
4644.	mdcy7o5+ch3o=>ch3oh+c5h10-1+mpe5j*o	1.10E+11	0.0	5000
4645.	mdcy7o5+ch3o=>ch3oh+mhx5d+nc3h7co	1.10E+11	0.0	5000
4646.	mdcy7o4+ch3o=>ch3oh+c5h10-1+mpe5j4*o	1.10E+11	0.0	5000
4647.	mdcy7o4+ch3o=>ch3oh+mpe4d+nc3h7coch2	1.10E+11	0.0	5000
4648.	mdcy7o3+ch3o=>ch3oh+c5h10-1+mpe5j3*o	1.10E+11	0.0	5000

4649.	mdcy7o3+ch3o=>ch3oh+mb3d+nprcoetp	1.10E+11	0.0	5000
4650.	mdcy6o4+ch3o=>ch3oh+c6h12-1+mb4j*o	1.10E+11	0.0	5000
4651.	mdcy6o4+ch3o=>ch3oh+mpe4d+nc4h9co	1.10E+11	0.0	5000
4652.	mdcy6o3+ch3o=>ch3oh+c6h12-1+mb4j3*o	1.10E+11	0.0	5000
4653.	mdcy6o3+ch3o=>ch3oh+mb3d+nc4h9coch2	1.10E+11	0.0	5000
4654.	mdcy6o2+ch3o=>ch3oh+mp2d+nc4h9coc2h4p	4.38E+11	0.0	5000
4655.	mdcy5o3+ch3o=>ch3oh+c7h14-1+mp3j*o	1.10E+11	0.0	5000
4656.	mdcy5o3+ch3o=>ch3oh+mb3d+c5h11co	1.10E+11	0.0	5000
4657.	mdcy5o2+ch3o=>ch3oh+mp2d+nc5h11coch2	4.38E+11	0.0	5000
4658.	mdcy4o2+ch3o=>ch3oh+mp2d+c6h13co	4.38E+11	0.0	5000
4659.	mdcy2om+ch3o=>ch3oh+c9h18co+ocho	2.19E+11	0.0	5000
4660.	mdcy10o8+ch3o2=>ch3o2h+c2h4+mo8j*o	2.00E+12	0.0	17700
4661.	mdcy10o8+ch3o2=>ch3o2h+hco+mn8d	4.00E+12	0.0	17700
4662.	mdcy10o7+ch3o2=>ch3o2h+c2h4+mo8j7*o	2.00E+12	0.0	17700
4663.	mdcy10o7+ch3o2=>ch3o2h+mo7d+ch2cho	4.00E+12	0.0	17700
4664.	mdcy10o6+ch3o2=>ch3o2h+c2h4+mo8j6*o	2.00E+12	0.0	17700
4665.	mdcy10o6+ch3o2=>ch3o2h+c2h4cho+mhp6d	4.00E+12	0.0	17700
4666.	mdcy9o7+ch3o2=>ch3o2h+c3h6+mhp7j*o	2.00E+12	0.0	17700
4667.	mdcy9o7+ch3o2=>ch3o2h+mo7d+ch3co	2.00E+12	0.0	17700
4668.	mdcy9o6+ch3o2=>ch3o2h+c3h6+mhp7j6*o	2.00E+12	0.0	17700
4669.	mdcy9o6+ch3o2=>ch3o2h+mhp6d+ch3coch2	2.00E+12	0.0	17700
4670.	mdcy9o5+ch3o2=>ch3o2h+c3h6+mhp7j5*o	2.00E+12	0.0	17700
4671.	mdcy9o5+ch3o2=>ch3o2h+mhx5d+acetoch2	2.00E+12	0.0	17700
4672.	mdcy8o6+ch3o2=>ch3o2h+c4h8-1+mhx6j*o	2.00E+12	0.0	17700
4673.	mdcy8o6+ch3o2=>ch3o2h+mhp6d+c2h5co	2.00E+12	0.0	17700
4674.	mdcy8o5+ch3o2=>ch3o2h+c4h8-1+mhx6j5*o	2.00E+12	0.0	17700
4675.	mdcy8o5+ch3o2=>ch3o2h+mhx5d+c2h5coch2	2.00E+12	0.0	17700
4676.	mdcy8o4+ch3o2=>ch3o2h+c4h8-1+mhx6j4*o	2.00E+12	0.0	17700
4677.	mdcy8o4+ch3o2=>ch3o2h+mpe4d+etcoetp	2.00E+12	0.0	17700
4678.	mdcy7o5+ch3o2=>ch3o2h+c5h10-1+mpe5j*o	2.00E+12	0.0	17700
4679.	mdcy7o5+ch3o2=>ch3o2h+mhx5d+nc3h7co	2.00E+12	0.0	17700
4680.	mdcy7o4+ch3o2=>ch3o2h+c5h10-1+mpe5j4*o	2.00E+12	0.0	17700
4681.	mdcy7o4+ch3o2=>ch3o2h+mpe4d+nc3h7coch2	2.00E+12	0.0	17700
4682.	mdcy7o3+ch3o2=>ch3o2h+c5h10-1+mpe5j3*o	2.00E+12	0.0	17700
4683.	mdcy7o3+ch3o2=>ch3o2h+mb3d+nprcoetp	2.00E+12	0.0	17700
4684.	mdcy6o4+ch3o2=>ch3o2h+c6h12-1+mb4j*o	2.00E+12	0.0	17700
4685.	mdcy6o4+ch3o2=>ch3o2h+mpe4d+nc4h9co	2.00E+12	0.0	17700
4686.	mdcy6o3+ch3o2=>ch3o2h+c6h12-1+mb4j3*o	2.00E+12	0.0	17700
4687.	mdcy6o3+ch3o2=>ch3o2h+mb3d+nc4h9coch2	2.00E+12	0.0	17700
4688.	mdcy6o2+ch3o2=>ch3o2h+mp2d+nc4h9coc2h4p	4.38E+11	0.0	5000
4689.	mdcy5o3+ch3o2=>ch3o2h+c7h14-1+mp3j*o	2.00E+12	0.0	17700
4690.	mdcy5o3+ch3o2=>ch3o2h+mb3d+c5h11co	2.00E+12	0.0	17700
4691.	mdcy5o2+ch3o2=>ch3o2h+mp2d+nc5h11coch2	4.38E+11	0.0	5000
4692.	mdcy4o2+ch3o2=>ch3o2h+mp2d+c6h13co	8.00E+12	0.0	17700
4693.	mdcy2om+ch3o2=>ch3o2h+c9h18co+ocho	4.00E+12	0.0	17700
4694.	md9d+ho2=md10ooh9j	1.50E+11	0.0	7800
4695.	md9d+ho2=md9ooh10j	1.50E+11	0.0	7800
4696.	md8d+ho2=md9ooh8j	1.50E+11	0.0	7800
4697.	md8d+ho2=md8ooh9j	1.50E+11	0.0	7800
4698.	md7d+ho2=md8ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
4699.	md7d+ho2=md7ooh8j	1.50E+11	0.0	7800
4700.	md6d+ho2=md7ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
4701.	md6d+ho2=md6ooh7j	1.50E+11	0.0	7800
4702.	md5d+ho2=md6ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
4703.	md5d+ho2=md5ooh6j	1.50E+11	0.0	7800
4704.	md4d+ho2=md5ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
4705.	md4d+ho2=md4ooh5j	1.50E+11	0.0	7800
4706.	md3d+ho2=md4ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
4707.	md3d+ho2=md3ooh4j	1.50E+11	0.0	7800
4708.	md2d+ho2=md3ooh2j	1.50E+11	0.0	7800
4709.	md2d+ho2=md2ooh3j	1.50E+11	0.0	7800
4710.	md10ooh8j=>mn8d+ch2o+oh	2.00E+13	0.0	31000
4711.	md10ooh7j=>mo7d+c2h4o2h	2.00E+13	0.0	28700
4712.	md10ooh6j=>mhp6d+prooh1-3	2.00E+13	0.0	28700
4713.	md9ooh7j=>mo7d+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4714.	md9ooh6j=>mhp6d+prooh2-1	2.00E+13	0.0	28700
4715.	md9ooh5j=>mhx5d+c2h4+ch3cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4716.	md8ooh10j=>mo8*o+c2h4+oh	2.00E+13	0.0	28700
4717.	md8ooh6j=>mhp6d+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4718.	md8ooh5j=>mhx5d+c4h8-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4719.	md8ooh4j=>mpe4d+c2h4+c2h5cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4720.	md7ooh9j=>mhp7*o+c3h6+oh	2.00E+13	0.0	28700
4721.	md7ooh5j=>mhx5d+nc3h7cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4722.	md7ooh4j=>mpe4d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4723.	md7ooh3j=>mb3d+c2h4+nc3h7cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4724.	md6ooh10j=>mo6ooh8j+c2h4	2.00E+13	0.0	28700
4725.	md6ooh9j=>mhp6d+c3h6+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4726.	md6ooh8j=>mhx6*o+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700

4727.	md6ooh4j=>mpe4d+nc4h9cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4728.	md6ooh3j=>mb3d+c6h12-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4729.	md6ooh2j=>mp2d+c2h4+nc4h9cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4730.	md5ooh9j=>mhp5ooh7j+c3h6	2.00E+13	0.0	28700
4731.	md5ooh8j=>mhx5ooh6j+c4h8-1	2.00E+13	0.0	28700
4732.	md5ooh7j=>mpe5*o+c5h10-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
4733.	md5ooh3j=>mb3d+c5h11cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4734.	md5ooh2j=>mp2d+c7h14-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4735.	md4ooh8j=>mb4*o+c2h4+c4h8-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
4736.	md4ooh7j=>mpe4d+c5h10-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4737.	md4ooh6j=>mb4*o+c6h12-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
4738.	md4ooh2j=>mp2d+c6h13cho+oh	2.00E+13	0.0	28700
4739.	md3ooh7j=>mp3*o+oh+c2h4+c5h10-1	2.00E+13	0.0	28700
4740.	md3ooh6j=>mb3ooh4j+c6h12-1	2.00E+13	0.0	28700
4741.	md3ooh5j=>mp3*o+c7h14-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
4742.	md2ooh6j=>mb2ooh4j+c6h12-1	2.00E+13	0.0	28700
4743.	md2ooh5j=>mp2d+c7h14-1+ho2	2.00E+13	0.0	28700
4744.	md2ooh4j=>me2*o+c8h16-1+oh	2.00E+13	0.0	28700
4745.	md10ooh9oo=>md9ooh10*o+oh	9.90E+07	1.0	30500
4746.	md10ooh8oo=>md8ooh10*o+oh	1.70E+07	1.0	23000
4747.	md10ooh7oo=>md7ooh10*o+oh	2.90E+06	1.0	20000
4748.	md10ooh6oo=>md6ooh10*o+oh	5.16E+05	1.0	19000
4749.	md9ooh10oo=>md10ooh9*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4750.	md9ooh8oo=>md8ooh9*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4751.	md9ooh7oo=>md7ooh9*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4752.	md9ooh6oo=>md6ooh9*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4753.	md9ooh5oo=>md5ooh9*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4754.	md8ooh10oo=>md10ooh8*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4755.	md8ooh9oo=>md9ooh8*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4756.	md8ooh7oo=>md7ooh8*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4757.	md8ooh6oo=>md6ooh8*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4758.	md8ooh5oo=>md5ooh8*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4759.	md8ooh4oo=>md4ooh8*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4760.	md7ooh10oo=>md10ooh7*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4761.	md7ooh9oo=>md9ooh7*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4762.	md7ooh8oo=>md8ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4763.	md7ooh6oo=>md6ooh7*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4764.	md7ooh5oo=>md5ooh7*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4765.	md7ooh4oo=>md4ooh7*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4766.	md7ooh3oo=>md3ooh7*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4767.	md6ooh10oo=>md10ooh6*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4768.	md6ooh9oo=>md9ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4769.	md6ooh8oo=>md8ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4770.	md6ooh7oo=>md7ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4771.	md6ooh5oo=>md5ooh6*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4772.	md6ooh4oo=>md4ooh6*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4773.	md6ooh3oo=>md3ooh6*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4774.	md6ooh2oo=>md2ooh6*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4775.	md5ooh9oo=>md9ooh5*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4776.	md5ooh8oo=>md8ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4777.	md5ooh7oo=>md7ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4778.	md5ooh6oo=>md6ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4779.	md5ooh4oo=>md4ooh5*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4780.	md5ooh3oo=>md3ooh5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4781.	md5ooh2oo=>md2ooh5*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4782.	md4ooh8oo=>md8ooh4*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4783.	md4ooh7oo=>md7ooh4*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4784.	md4ooh6oo=>md6ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4785.	md4ooh5oo=>md5ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4786.	md4ooh3oo=>md3ooh4*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4787.	md4ooh2oo=>md2ooh4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4788.	md3ooh7oo=>md7ooh3*o+oh	2.60E+05	1.0	16000
4789.	md3ooh6oo=>md6ooh3*o+oh	1.50E+06	1.0	17000
4790.	md3ooh5oo=>md5ooh3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
4791.	md3ooh4oo=>md4ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4792.	md3ooh2oo=>md2ooh3*o+oh	5.00E+07	1.0	27500
4793.	md2ooh6oo=>md6ooh2*o+oh	2.60E+05	1.0	14000
4794.	md2ooh5oo=>md5ooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	15000
4795.	md2ooh4oo=>md4ooh2*o+oh	8.60E+06	1.0	18000
4796.	md2ooh3oo=>md3ooh2*o+oh	5.00E+07	1.0	25500
4797.	md2oohmoo=>mdmooh2*o+oh	1.50E+06	1.0	21700
4798.	mdmooh2oo=>md2oohm*o+oh	2.90E+06	1.0	28500
4799.	md10ooh9oo=>md9ooh10oo	7.27E+09	0.0	12700
4800.	md9ooh10oo=>md10ooh9oo	7.27E+09	0.0	12700
4801.	md9ooh8oo=>md8ooh9oo	7.27E+09	0.0	12700
4802.	md8ooh9oo=>md9ooh8oo	7.27E+09	0.0	12700
4803.	md8ooh7oo=>md7ooh8oo	7.27E+09	0.0	12700
4804.	md7ooh8oo=>md8ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700

4805.	md7ooh6oo=>md6ooh7oo	7.27E+09	0.0	12700
4806.	md6ooh7oo=>md7ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
4807.	md6ooh5oo=>md5ooh6oo	7.27E+09	0.0	12700
4808.	md5ooh6oo=>md6ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
4809.	md5ooh4oo=>md4ooh5oo	7.27E+09	0.0	12700
4810.	md4ooh5oo=>md5ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
4811.	md4ooh3oo=>md3ooh4oo	7.27E+09	0.0	12700
4812.	md3ooh4oo=>md4ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
4813.	md3ooh2oo=>md2ooh3oo	7.27E+09	0.0	12700
4814.	md2ooh3oo=>md3ooh2oo	7.27E+09	0.0	12700
4815.	md9ooh10*o=>mn9*o+hco+oh	1.50E+16	0.0	43000
4816.	md8ooh10*o=>mo8*o+ch2cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4817.	md7ooh10*o=>mhx6j+choc2h4cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4818.	md7ooh10*o=>mhp7*o+c2h4cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4819.	md6ooh10*o=>mhx6*o+c3h6cho-1+oh	1.50E+16	0.0	43000
4820.	md6ooh10*o=>mpe5j+choc3h6cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4821.	md10ooh9*o=>mn9j*o+ch2o+oh	1.50E+16	0.0	43000
4822.	md8ooh9*o=>mo8*o+ch3co+oh	1.50E+16	0.0	43000
4823.	md7ooh9*o=>mhp7*o+ch3coch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4824.	md7ooh9*o=>mhx6j+c4ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4825.	md6ooh9*o=>mpe5j+c5ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4826.	md6ooh9*o=>mhx6*o+acetoch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4827.	md5ooh9*o=>mpe5*o+c3h6coch3-1+oh	1.50E+16	0.0	43000
4828.	md5ooh9*o=>mb4j+c6ald5oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4829.	md10ooh8*o=>mn9j8*o+ch2o+oh	1.50E+16	0.0	43000
4830.	md9ooh8*o=>mo8j*o+ch3cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4831.	md7ooh8*o=>mhp7*o+c2h5co+oh	1.50E+16	0.0	43000
4832.	md7ooh8*o=>mhx6j+c4ald2oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4833.	md6ooh8*o=>mhx6*o+c2h5coch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4834.	md6ooh8*o=>mpe5j+c5ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4835.	md5ooh8*o=>mpe5*o+etcoetp+oh	1.50E+16	0.0	43000
4836.	md5ooh8*o=>mb4j+c6ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4837.	md4ooh8*o=>mp3j+c7ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4838.	md4ooh8*o=>mb4*o+c2h5coc3h6+oh	1.50E+16	0.0	43000
4839.	md10ooh7*o=>ch2o+mn9j7*o+oh	1.50E+16	0.0	43000
4840.	md9ooh7*o=>mo8j7*o+ch3cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4841.	md8ooh7*o=>mhp7j*o+c2h5cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4842.	md6ooh7*o=>mhx6*o+nc3h7co+oh	1.50E+16	0.0	43000
4843.	md5ooh7*o=>mpe5*o+nc3h7coch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4844.	md5ooh7*o=>mb4j+c6ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4845.	md4ooh7*o=>mp3j+c7ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4846.	md4ooh7*o=>mb4*o+nprcoetp+oh	1.50E+16	0.0	43000
4847.	md3ooh7*o=>me2j+c8ald5oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4848.	md3ooh7*o=>mp3*o+nc3h7coc3h6-1+oh	1.50E+16	0.0	43000
4849.	md10ooh6*o=>ch2o+mn9j6*o+oh	1.50E+16	0.0	43000
4850.	md9ooh6*o=>mo8j6*o+ch3cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4851.	md8ooh6*o=>mhp7j6*o+c2h5cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4852.	md7ooh6*o=>mhx6j*o+nc3h7cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4853.	md5ooh6*o=>mpe5*o+nc4h9co+oh	1.50E+16	0.0	43000
4854.	md4ooh6*o=>mb4*o+nc4h9coch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4855.	md4ooh6*o=>mp3j+c7ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4856.	md3ooh6*o=>me2j+c8ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4857.	md3ooh6*o=>mp3*o+nc4h9coc2h4p+oh	1.50E+16	0.0	43000
4858.	md2ooh6*o=>ch3oco+c9ald5oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4859.	md9ooh5*o=>mo8j5*o+ch3cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4860.	md8ooh5*o=>mhp7j5*o+c2h5cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4861.	md7ooh5*o=>mhx6j5*o+nc3h7cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4862.	md6ooh5*o=>mpe5j*o+nc4h9cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4863.	md4ooh5*o=>mb4*o+c5h11co+oh	1.50E+16	0.0	43000
4864.	md3ooh5*o=>me2j+c8ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4865.	md3ooh5*o=>mp3*o+nc5h11coch2+oh	1.50E+16	0.0	43000
4866.	md2ooh5*o=>ch3oco+c9ald4oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4867.	md8ooh4*o=>mhp7j4*o+c2h5cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4868.	md7ooh4*o=>mhx6j4*o+nc3h7cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4869.	md6ooh4*o=>mpe5j4*o+nc4h9cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4870.	md5ooh4*o=>mb4j*o+c5h11cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4871.	md3ooh4*o=>me2j+c8ald2oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4872.	md2ooh4*o=>ch3oco+c9ald3oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4873.	md7ooh3*o=>mhx6j3*o+nc3h7cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4874.	md6ooh3*o=>mpe5j3*o+nc4h9cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4875.	md5ooh3*o=>mb4j3*o+c5h11cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4876.	md4ooh3*o=>mp3j*o+c6h13cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4877.	md2ooh3*o=>ch3oco+c9ald2oxo+oh	1.50E+16	0.0	43000
4878.	md6ooh2*o=>mpe5j2*o+nc4h9cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4879.	md5ooh2*o=>mb4j2*o+c5h11cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4880.	md4ooh2*o=>mp3j2*o+c6h13cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4881.	md3ooh2*o=>c7h15cho+me2j*o+oh	1.50E+16	0.0	43000
4882.	mdmooh2*o=>daoj2*o+ch2o+oh	1.50E+16	0.0	43000

4883.	md2oohm*o=>chooco+c8h17cho+oh	1.50E+16	0.0	43000
4884.	hco+mn9j=md10*o	1.00E+13	0.0	0
4885.	md10*o+o2=md10j*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
4886.	md10*o+h=md10j*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
4887.	md10*o+oh=md10j*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
4888.	md10*o+o=md10j*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
4889.	md10*o+ho2=md10j*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
4890.	mdm*o+o2=mdmj*o+ho2	2.00E+13	0.5	42200
4891.	mdm*o+h=mdmj*o+h2	4.00E+13	0.0	4200
4892.	mdm*o+oh=mdmj*o+h2o	2.69E+10	0.8	-340
4893.	mdm*o+o=mdmj*o+oh	5.00E+12	0.0	1790
4894.	mdm*o+ho2=mdmj*o+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
4895.	mdmj*o=daoj+co	1.83E+15	-0.7	12910
4896.	me2j+c8h1518(+m)=md9d(+m)	4.90E+14	-0.5	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+0			
4897.	md9d=mp3j+c7h1317	1.58E+17	0.0	87040
4898.	md9d=mb4j+c6h1116	1.58E+17	0.0	87040
4899.	md9d=mpe5j+c5h915	1.58E+17	0.0	87040
4900.	md9d=mhx6j+c4h7-4	1.58E+17	0.0	87040
4901.	md9d=mhp7j+c3h5-a	7.94E+15	0.0	70740
4902.	c2h3+mo8j=md9d	2.05E+13	0.0	0
4903.	md9d8j+h=md9d	1.00E+13	0.0	0
4904.	md8d7j+h=md8d	1.00E+13	0.0	0
4905.	md7d6j+h=md7d	1.00E+13	0.0	0
4906.	md6d5j+h=md6d	1.00E+13	0.0	0
4907.	md5d4j+h=md5d	1.00E+13	0.0	0
4908.	md4d3j+h=md4d	1.00E+13	0.0	0
4909.	md3d2j+h=md3d	1.00E+13	0.0	0
4910.	md9d+o=md9d8j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4911.	md9d+o=md9d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4912.	md9d+h=md9d8j+h2	5.40E+06	2.5	-1900
4913.	md9d+h=md9d2j+h2	5.40E+06	2.5	-1900
4914.	md9d+oh=md9d8j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4915.	md9d+oh=md9d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4916.	md9d+ho2=md9d8j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4917.	md9d+ho2=md9d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4918.	md9d+ch3o=md9d8j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4919.	md9d+ch3o=md9d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4920.	md9d+o2=md9d8j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4921.	md9d+o2=md9d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
4922.	md8d+o=md9d8j+oh	1.74E+11	0.7	5900
4923.	md8d+o=md8d7j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4924.	md8d+o=md8d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4925.	md8d+h=md8d7j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4926.	md8d+h=md8d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4927.	md8d+oh=md8d7j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4928.	md8d+oh=md8d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4929.	md8d+ho2=md8d7j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4930.	md8d+ho2=md8d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4931.	md8d+ch3o=md9d8j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
4932.	md8d+ch3o=md8d7j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4933.	md8d+ch3o=md8d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4934.	md8d+o2=md8d7j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4935.	md8d+o2=md9d8j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
4936.	md8d+o2=md8d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
4937.	md7d+o=md8d7j+oh	1.74E+11	0.7	5900
4938.	md7d+o=md7d6j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4939.	md7d+o=md7d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4940.	md7d+h=md8d7j+h2	1.74E+05	2.5	2510
4941.	md7d+h=md7d6j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4942.	md7d+h=md7d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4943.	md7d+oh=md8d7j+h2o	3.00E+06	2.0	-298
4944.	md7d+oh=md7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4945.	md7d+oh=md7d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4946.	md7d+ho2=md8d7j+h2o2	9.60E+03	2.6	13900
4947.	md7d+ho2=md7d6j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4948.	md7d+ho2=md7d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4949.	md7d+ch3o=md8d7j+ch3oh	1.98E+12	0.0	4000
4950.	md7d+ch3o=md7d6j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4951.	md7d+ch3o=md7d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4952.	md7d+o2=md8d7j+ho2	6.00E+12	0.0	37000
4953.	md7d+o2=md7d6j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4954.	md7d+o2=md7d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
4955.	md6d+o=md7d6j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4956.	md6d+o=md6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4957.	md6d+o=md6d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4958.	md6d+h=md7d6j+h2	5.40E+04	2.5	-1900

4959. md6d+h=md6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4960. md6d+h=md6d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4961. md6d+oh=md7d6j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4962. md6d+oh=md6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4963. md6d+oh=md6d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4964. md6d+ho2=md7d6j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4965. md6d+ho2=md6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4966. md6d+ho2=md6d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4967. md6d+ch3o=md7d6j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4968. md6d+ch3o=md6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4969. md6d+ch3o=md6d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4970. md6d+o2=md7d6j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4971. md6d+o2=md6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4972. md6d+o2=md6d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
4973. md5d+o=md6d5j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4974. md5d+o=md5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4975. md5d+o=md5d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4976. md5d+h=md6d5j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4977. md5d+h=md5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4978. md5d+h=md5d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4979. md5d+oh=md6d5j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4980. md5d+oh=md5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4981. md5d+oh=md5d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4982. md5d+ho2=md6d5j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4983. md5d+ho2=md5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4984. md5d+ho2=md5d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
4985. md5d+ch3o=md6d5j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4986. md5d+ch3o=md5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4987. md5d+ch3o=md5d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
4988. md5d+o2=md6d5j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4989. md5d+o2=md5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
4990. md5d+o2=md5d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
4991. md4d+o=md5d4j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4992. md4d+o=md4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4993. md4d+o=md4d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
4994. md4d+h=md5d4j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4995. md4d+h=md4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4996. md4d+h=md4d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
4997. md4d+oh=md5d4j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4998. md4d+oh=md4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
4999. md4d+oh=md4d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
5000. md4d+ho2=md5d4j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5001. md4d+ho2=md4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5002. md4d+ho2=md4d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5003. md4d+ch3o=md5d4j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5004. md4d+ch3o=md4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5005. md4d+ch3o=md4d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5006. md4d+o2=md4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
5007. md4d+o2=md5d4j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
5008. md4d+o2=md4d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
5009. md3d+o=md4d3j+oh	8.80E+10	0.7	3250
5010. md3d+o=md3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
5011. md3d+h=md4d3j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
5012. md3d+h=md3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
5013. md3d+oh=md4d3j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
5014. md3d+oh=md3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
5015. md3d+ho2=md4d3j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5016. md3d+ho2=md3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5017. md3d+ch3o=md4d3j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5018. md3d+ch3o=md3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5019. md3d+o2=md4d3j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
5020. md3d+o2=md3d2j+ho2	4.00E+13	0.0	37300
5021. md2d+o=md3d2j+oh	8.80E+10	0.7	3250
5022. md2d+h=md3d2j+h2	5.40E+04	2.5	-1900
5023. md2d+oh=md3d2j+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
5024. md2d+ho2=md3d2j+h2o2	6.40E+03	2.6	12400
5025. md2d+ch3o=md3d2j+ch3oh	1.88E+12	0.0	1200
5026. md2d+o2=md3d2j+ho2	4.00E+12	0.0	37000
5027. md9d+o=mn9j+hco	1.00E+11	0.0	-1050
5028. md8d+o=mo8j+ch3co	1.00E+11	0.0	-1050
5029. md7d+o=mhp7j+c2h5co	1.00E+11	0.0	-1050
5030. md6d+o=mhx6j+nc3h7co	1.00E+11	0.0	-1050
5031. md5d+o=mpe5j+nc4h9co	1.00E+11	0.0	-1050
5032. md4d+o=mb4j+c5h11co	1.00E+11	0.0	-1050
5033. md3d+o=mp3j+c6h13co	1.00E+11	0.0	-1050
5034. md2d+o=me2j+c7h15co	1.00E+11	0.0	-1050
5035. md9d8j=c4h6+mhx6j	1.30E+13	0.0	35900
5036. md9d2j=c7h1317+mp2d	1.30E+13	0.0	35900

5037. c9h16co+ch3o=md9d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5038. md8d7j=c5h813+mpe5j	1.30E+13	0.0	35900
5039. md8d2j=c7h1315+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
5040. c9h16co+ch3o=md8d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5041. md7d6j=c6h1013+mb4j	1.30E+13	0.0	35900
5042. md7d6j=mn8d6d+ch3	1.30E+13	0.0	38200
5043. md7d2j=c7h1314+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
5044. c9h16co+ch3o=md7d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5045. md6d5j=c7h1213+mp3j	1.30E+13	0.0	35900
5046. md6d5j=mo7d5d+c2h5	1.30E+13	0.0	38200
5047. md6d2j=c7h1313+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
5048. c9h16co+ch3o=md6d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5049. md5d4j=c8h1413+me2j	1.30E+13	0.0	35900
5050. md5d4j=mhp6d4d+nc3h7	1.30E+13	0.0	38200
5051. md5d2j=c7h1312+mp2d	1.30E+13	0.0	35900
5052. c9h16co+ch3o=md5d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5053. md4d3j=c9h1613+ch3oco	1.30E+13	0.0	33900
5054. md4d3j=mhx5d3d+pc4h9	1.30E+13	0.0	35900
5055. md4d2j=mp2d+c7h1311	1.30E+13	0.0	50000
5056. c9h16co+ch3o=md4d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5057. c9h16co+ch3o=md3d2j	5.00E+11	0.0	-1000
5058. md3d2j=mpe4d2d+c5h11-1	1.30E+13	0.0	35900
5059. c9h18co+h=>c9h19-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5060. c9h18co+oh=>c9h19-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5061. c9h18co+o=>c9h18-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5062. c9h19-1=c2h4+c7h15-1	9.12E+11	0.3	27240
5063. c9h19-2=c3h6+c6h13-1	6.02E+10	0.8	27822
5064. c9h19-3=c4h8-1+c5h11-1	2.04E+13	0.0	28496
5065. c9h19-3=c8h16-1+ch3	9.55E+09	1.1	29390
5066. c9h19-4=pc4h9+c5h10-1	2.04E+13	0.0	28496
5067. c9h19-4=c2h5+c7h14-1	8.51E+09	1.1	27025
5068. c9h19-5=nc3h7+c6h12-1	5.49E+11	0.6	28087
5069. c9h19-1=c9h18-1+h	1.28E+12	0.2	38372
5070. c9h19-2=c9h18-1+h	1.95E+15	-0.6	37371
5071. c9h19-2=h+c9h18-2	2.74E+15	-0.7	36120
5072. c9h19-3=h+c9h18-2	1.89E+15	-0.7	36028
5073. c9h19-3=h+c9h18-3	1.08E+15	-0.7	35875
5074. c9h19-4=h+c9h18-3	1.08E+15	-0.7	35875
5075. c9h19-4=h+c9h18-4	1.08E+15	-0.7	35875
5076. c9h19-5=h+c9h18-4	2.11E+15	-0.6	35872
5077. c9h19-1+o2=c9h18-1+ho2	1.90E+12	0.0	5000
5078. c9h19-2+o2=c9h18-2+ho2	1.90E+12	0.0	5000
5079. c9h19-2+o2=c9h18-1+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5080. c9h19-3+o2=c9h18-2+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5081. c9h19-3+o2=c9h18-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5082. c9h19-4+o2=c9h18-3+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5083. c9h19-4+o2=c9h18-4+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5084. c9h19-5+o2=c9h18-4+ho2	1.80E+10	0.0	-2000
5085. c9h19-1=c9h19-4	6.38E-04	4.3	9944
Reverse Arrhenius coefficients:	2.08E-03	4.1	12085
5086. c9h19-1=c9h19-5	2.29E+01	2.8	10757
Reverse Arrhenius coefficients:	2.72E+00	3.2	12849
5087. c9h19-2=c9h19-3	2.95E+00	3.1	11017
Reverse Arrhenius coefficients:	2.95E+00	3.1	11017
5088. c9h19-2=c9h19-4	1.86E+00	3.3	13199
Reverse Arrhenius coefficients:	1.86E+00	3.3	13199
5089. c9h19-2=c9h19-5	1.41E+00	3.3	16146
Reverse Arrhenius coefficients:	2.82E+00	3.3	16146
5090. c9h19-3=c9h19-4	1.41E+00	3.3	16146
Reverse Arrhenius coefficients:	1.41E+00	3.3	16146
5091. c9h19-1+o2=non1o2	9.00E+18	-2.5	0
5092. c9h19-2+o2=non2o2	1.70E+19	-2.5	0
5093. c9h19-3+o2=non3o2	1.80E+19	-2.5	0
5094. c9h19-4+o2=non4o2	1.80E+19	-2.5	0
5095. c9h19-5+o2=non5o2	1.80E+19	-2.5	0
5096. non1o2=non1o2h3j	1.70E+07	1.0	25000
5097. non2o2=non2o2h4j	1.70E+07	1.0	25000
5098. non3o2=non3o2h1j	2.50E+07	1.0	28000
5099. non3o2=non3o2h5j	1.70E+07	1.0	25000
5100. non4o2=non4o2h2j	1.70E+07	1.0	25000
5101. non5o2=non5o2h2j	1.70E+07	1.0	25000
5102. non1o2h3j+o2=non1o2h3o2	1.80E+19	-2.5	0
5103. non2o2h4j+o2=non2o2h4o2	1.80E+19	-2.5	0
5104. non3o2h1j+o2=non3o2h1o2	9.00E+18	-2.5	0
5105. non3o2h5j+o2=non3o2h5o2	1.80E+19	-2.5	0
5106. non4o2h2j+o2=non4o2h2o2	1.80E+19	-2.5	0
5107. non5o2h2j+o2=non5o2h2o2	1.80E+19	-2.5	0
5108. non1o2h3o2=non3o2h1*o+oh	8.60E+06	1.0	23000

5109. non2o2h4o2=non4o2h2*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5110. non3o2h1o2=non1o2h3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5111. non3o2h5o2=non5o2h3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5112. non4o2h2o2=non2o2h4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5113. non5o2h2o2=non2o2h5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5114. non3o2h1*o=>ch2cho+c6h13cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
5115. non4o2h2*o=>c5h11cho+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5116. non1o2h3*o=>ch2o+c6h13coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5117. non5o2h3*o=>nc4h9cho+c2h5coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5118. non2o2h4*o=>ch3cho+nc5h11coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5119. non2o2h5*o=>ch3cho+nc4h9coc2h4p+oh	1.00E+16	0.0	43000
5120. c9h18-1+ch3=c7h15-1+c3h6	9.60E+10	0.0	8000
5121. c9h18-1+oh=ch3+c7h15cho	1.00E+12	0.0	0
5122. c9h18-1+oh=ch2o+c8h17-1	1.00E+12	0.0	0
5123. c9h18-2+oh=c2h5+c6h13cho	1.00E+12	0.0	0
5124. c9h18-2+oh=ch3cho+c7h15-1	1.00E+12	0.0	0
5125. c9h18-3+oh=nc3h7+c5h11cho	1.00E+12	0.0	0
5126. c9h18-3+oh=c2h5cho+c6h13-1	1.00E+12	0.0	0
5127. c9h18-4+oh=pc4h9+nc4h9cho	1.00E+12	0.0	0
5128. c9h18-4+oh=nc3h7cho+c5h11-1	1.00E+12	0.0	0
5129. c9h18-1+o=ch2o+c8h16-1	3.40E+07	1.8	550
5130. c9h18-2+o=ch3cho+c7h14-1	3.40E+07	1.8	550
5131. c9h18-2+o=c2h4+c6h13cho	3.40E+07	1.8	550
5132. c9h18-3+o=c2h5cho+c6h12-1	3.40E+07	1.8	550
5133. c9h18-3+o=c3h6+c5h11cho	3.40E+07	1.8	550
5134. c9h18-4+o=nc3h7cho+c5h10-1	3.40E+07	1.8	550
5135. c9h18-4+o=c4h8-1+nc4h9cho	3.40E+07	1.8	550
5136. c9h18-1+ho2=oh+noncy1o2	1.00E+12	0.0	14400
5137. c9h18-2+ho2=oh+noncy2o3	1.00E+12	0.0	14400
5138. c9h18-3+ho2=oh+noncy3o4	1.00E+12	0.0	14400
5139. c9h18-4+ho2=oh+noncy4o5	1.00E+12	0.0	14400
5140. c9h18-1+h=h2+c9h17-13	1.70E+05	2.5	2490
5141. c9h18-1+oh=h2o+c9h17-13	3.10E+06	2.0	-300
5142. c9h18-1+ho2=h2o2+c9h17-13	6.80E+03	2.5	10115
5143. c9h18-1+ch3=ch4+c9h17-13	2.20E+00	3.5	5675
5144. c9h18-1+ch3o2=ch3o2h+c9h17-13	2.20E+00	3.5	5675
5145. c9h18-1+c2h5=c2h6+c9h17-13	2.20E+00	3.5	6835
5146. c9h18-1+o=oh+c9h17-13	6.00E+10	0.7	7682
5147. c9h18-2+h=h2+c9h17-13	1.70E+05	2.5	2490
5148. c9h18-2+oh=h2o+c9h17-13	3.10E+06	2.0	-300
5149. c9h18-2+ho2=h2o2+c9h17-13	6.80E+03	2.5	10115
5150. c9h18-2+ch3=ch4+c9h17-13	2.20E+00	3.5	5675
5151. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+c9h17-13	2.20E+00	3.5	5675
5152. c9h18-2+c2h5=c2h6+c9h17-13	2.20E+00	3.5	6835
5153. c9h18-2+o=oh+c9h17-13	6.00E+10	0.7	7682
5154. c9h18-3+h=h2+c9h17-24	1.70E+05	2.5	2490
5155. c9h18-2+oh=h2o+c9h17-24	3.10E+06	2.0	-300
5156. c9h18-2+ho2=h2o2+c9h17-24	6.80E+03	2.5	10115
5157. c9h18-2+ch3=ch4+c9h17-24	2.20E+00	3.5	5675
5158. c9h18-2+ch3o2=ch3o2h+c9h17-24	2.20E+00	3.5	5675
5159. c9h18-2+c2h5=c2h6+c9h17-24	2.20E+00	3.5	6835
5160. c9h18-2+o=oh+c9h17-24	6.00E+10	0.7	7682
5161. c9h18-3+h=h2+c9h17-24	1.70E+05	2.5	2490
5162. c9h18-3+oh=h2o+c9h17-24	3.10E+06	2.0	-300
5163. c9h18-3+ho2=h2o2+c9h17-24	6.80E+03	2.5	10115
5164. c9h18-3+ch3=ch4+c9h17-24	2.20E+00	3.5	5675
5165. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+c9h17-24	2.20E+00	3.5	5675
5166. c9h18-3+c2h5=c2h6+c9h17-24	2.20E+00	3.5	6835
5167. c9h18-3+o=oh+c9h17-24	6.00E+10	0.7	7682
5168. c9h18-3+h=h2+c9h17-35	1.70E+05	2.5	2490
5169. c9h18-3+oh=h2o+c9h17-35	3.10E+06	2.0	-300
5170. c9h18-3+ho2=h2o2+c9h17-35	6.80E+03	2.5	10115
5171. c9h18-3+ch3=ch4+c9h17-35	2.20E+00	3.5	5675
5172. c9h18-3+ch3o2=ch3o2h+c9h17-35	2.20E+00	3.5	5675
5173. c9h18-3+c2h5=c2h6+c9h17-35	2.20E+00	3.5	6835
5174. c9h18-3+o=oh+c9h17-35	6.00E+10	0.7	7682
5175. c9h18-4+h=h2+c9h17-35	1.70E+05	2.5	2490
5176. c9h18-4+oh=h2o+c9h17-35	3.10E+06	2.0	-300
5177. c9h18-4+ho2=h2o2+c9h17-35	6.80E+03	2.5	10115
5178. c9h18-4+ch3=ch4+c9h17-35	2.20E+00	3.5	5675
5179. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+c9h17-35	2.20E+00	3.5	5675
5180. c9h18-4+c2h5=c2h6+c9h17-35	2.20E+00	3.5	6835
5181. c9h18-4+o=oh+c9h17-35	6.00E+10	0.7	7682
5182. c9h18-4+h=h2+c9h17-46	1.70E+05	2.5	2490
5183. c9h18-4+oh=h2o+c9h17-46	3.10E+06	2.0	-300
5184. c9h18-4+ho2=h2o2+c9h17-46	6.80E+03	2.5	10115
5185. c9h18-4+ch3=ch4+c9h17-46	2.20E+00	3.5	5675
5186. c9h18-4+ch3o2=ch3o2h+c9h17-46	2.20E+00	3.5	5675

5187. c9h18-4+c2h5=c2h6+c9h17-46	2.20E+00	3.5	6835
5188. c9h18-4+o=oh+c9h17-46	6.00E+10	0.7	7682
5189. c9h17-13=c4h6+c5h11-1	2.50E+13	0.0	35000
5190. c9h17-13+h=c9h18-1	1.00E+13	0.0	0
5191. c9h17-13+ho2=oh+c2h3cho+c6h13-1	1.00E+12	0.0	8000
5192. c9h17-24=c5h813+pc4h9	2.50E+13	0.0	35000
5193. c9h17-35=c6h1013+nc3h7	2.50E+13	0.0	35000
5194. c9h17-46=c7h1213+c2h5	2.50E+13	0.0	35000
5195. c8h17cho+h=c8h17co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5196. c8h17cho+oh=c8h17co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5197. c8h17cho+ho2=c8h17co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5198. c8h17cho+o2=c8h17co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5199. c8h17cho+o=c8h17co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5200. c8h17co=c8h17-1+co	1.83E+15	-0.7	12910
5201. c8h17co+ho2=>co2+oh+c8h17-1	2.00E+13	0.0	0
5202. c9h18co=>hcco+c8h17-1	1.50E+11	0.0	3000
5203. c8h17chco+h=c9h19-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5204. c8h17chco+oh=c9h19-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5205. c8h17chco+o=c9h18-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5206. c8h16-1=c3h5-a+c5h11-1	2.50E+16	1.0	70000
5207. c8h16-1=c4h7-14+pc4h9	1.00E+16	0.0	71000
5208. c8h16-1=c5h915+nc3h7	1.00E+16	0.0	71000
5209. c8h16-1=c6h1116+c2h5	1.00E+16	0.0	71000
5210. c8h15-13+h=c8h16-1	1.00E+13	0.0	0
5211. c8h15-24+h=c8h16-2	1.00E+13	0.0	0
5212. c8h15-35+h=c8h16-3	1.00E+13	0.0	0
5213. c8h15-35+h=c8h16-4	1.00E+13	0.0	0
5214. c8h16-1+ho2=>oh+ch2o+c7h14-1	2.50E+12	1.0	25000
5215. c8h16-2+ho2=>oh+ch3cho+c6h12-1	2.50E+12	1.0	25000
5216. c8h16-2+ho2=>oh+c2h4+c5h11cho	2.50E+12	1.0	25000
5217. c8h16-3+ho2=>oh+c2h5cho+c5h10-1	2.50E+12	1.0	25000
5218. c8h16-3+ho2=>oh+c3h6+nc4h9cho	2.50E+12	1.0	25000
5219. c8h16-4+ho2=>oh+nc3h7cho+c4h8-1	5.00E+12	1.0	25000
5220. c8h16-1+ch3=c6h13-1+c3h6	9.60E+10	0.0	8000
5221. c8h16-1+oh=ch2o+c7h15-1	1.40E+12	0.0	-900
5222. c8h16-1+oh=ch3+c6h13cho	1.40E+12	0.0	-900
5223. c8h16-2+oh=ch3cho+c6h13-1	1.40E+12	0.0	-900
5224. c8h16-2+oh=c2h5+c5h11cho	1.40E+12	0.0	-900
5225. c8h16-3+oh=c2h5cho+c5h11-1	1.40E+12	0.0	-900
5226. c8h16-3+oh=nc3h7+nc4h9cho	1.40E+12	0.0	-900
5227. c8h16-4+oh=nc3h7cho+pc4h9	2.80E+12	0.0	-900
5228. c8h16-1+o=ch2o+c7h14-1	1.00E+11	0.0	-1050
5229. c8h16-2+o=ch3cho+c6h12-1	1.00E+11	0.0	-1050
5230. c8h16-2+o=c2h4+c5h11cho	1.00E+11	0.0	-1050
5231. c8h16-3+o=c2h5cho+c5h10-1	1.00E+11	0.0	-1050
5232. c8h16-1+o=c3h6+nc4h9cho	1.00E+11	0.0	-1050
5233. c8h16-4+o=nc3h7cho+c4h8-1	2.00E+11	0.0	-1050
5234. c8h16-1+h=c8h15-13+h2	3.38E+05	2.4	207
5235. c8h16-1+oh=c8h15-13+h2o	2.76E+04	2.6	-1919
5236. c8h16-1+ho2=c8h15-13+h2o2	4.82E+03	2.5	10530
5237. c8h16-1+ch3=c8h15-13+ch4	3.69E+00	3.3	4002
5238. c8h16-1+ch3o2=c8h15-13+ch3o2h	4.82E+03	2.5	10530
5239. c8h16-1+c2h5=c8h15-13+c2h6	1.00E+11	0.0	9800
5240. c8h16-1+o=c8h15-13+oh	6.60E+05	2.4	1210
5241. c8h16-1+nc3h7=c3h8+c8h15-13	1.00E+11	0.0	8300
5242. c8h16-1+c2h3=c8h15-13+c2h4	2.21E+00	3.5	4690
5243. c8h16-1+oh=h2o+c5h8-14+nc3h7	1.12E+06	2.0	-1391
5244. c8h16-1+oh=h2o+c5h10-1+c3h5-a	1.12E+06	2.0	-1391
5245. c8h16-1+oh=h2o+c4h8-1+c4h7-14	1.12E+06	2.0	-1391
5246. c8h16-1+oh=h2o+c3h6+c5h915	1.00E+06	2.0	-597
5247. c8h16-2+h=h2+c8h15-13	1.70E+05	2.5	2490
5248. c8h16-2+oh=h2o+c8h15-15	3.10E+06	2.0	-300
5249. c8h16-2+ho2=h2o2+c8h15-13	6.80E+03	2.5	10115
5250. c8h16-2+ch3=ch4+c8h15-13	2.20E+00	3.5	5675
5251. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+c8h15-13	2.20E+00	3.5	5675
5252. c8h16-2+c2h5=c2h6+c8h15-13	2.20E+00	3.5	6835
5253. c8h16-2+o=oh+c8h15-13	6.00E+10	0.7	7682
5254. c8h16-2+h=h2+c8h15-24	1.70E+05	2.5	2490
5255. c8h16-2+oh=h2o+c8h15-24	3.10E+06	2.0	-300
5256. c8h16-2+ho2=h2o2+c8h15-24	6.80E+03	2.5	10115
5257. c8h16-2+ch3=ch4+c8h15-24	2.20E+00	3.5	5675
5258. c8h16-2+ch3o2=ch3o2h+c8h15-24	2.20E+00	3.5	5675
5259. c8h16-2+c2h5=c2h6+c8h15-24	2.20E+00	3.5	6835
5260. c8h16-2+o=oh+c8h15-24	6.00E+10	0.7	7682
5261. c8h15-13=c4h6+pc4h9	1.34E+15	-0.5	38320
5262. c8h15-13+ho2=oh+acrol+c5h11-1	1.00E+12	0.0	8000
5263. c8h16-1+oh=c8h16oh2j1	1.13E+05	2.3	-1241
5264. c7h15cho+h=h2+c7h15co	4.00E+13	0.0	4200

5265.	c7h15cho+oh=h2o+c7h15co	4.20E+12	0.0	500
5266.	c7h15cho+ho2=h2o2+c7h15co	1.00E+12	0.0	10000
5267.	c7h15cho+ch3=ch4+c7h15co	2.00E-06	5.6	2500
5268.	c7h15cho=c2h5=c2h6+c7h15co	1.30E+12	0.0	8500
5269.	c7h15co+M=co+c7h15-1+M	8.64E+15	0.0	14400
5270.	c7h15co+ho2=>co2+oh+c7h15-1	2.00E+13	0.0	0
5271.	c8h17-1=c8h17-2	1.00E+08	1.0	17400
5272.	c8h17-1=c8h17-3	5.70E+08	1.0	12000
5273.	c8h17-1=c8h17-4	3.30E+09	1.0	17300
5274.	c8h17-1=c2h4+c6h13-1	2.00E+13	0.0	28700
5275.	c8h17-2=c3h6+c5h11-1	2.00E+13	0.0	28700
5276.	c8h17-3=c4h8-1+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700
5277.	c8h17-4=nc3h7+c5h10-1	4.00E+13	0.0	28700
5278.	c8h17-1=c8h16-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5279.	c8h17-2=c8h16-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5280.	c8h17-3=c8h16-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5281.	c8h17-4=c8h16-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5282.	c8h17-1+o2=oct1o2	9.00E+18	-2.5	0
5283.	c8h17-2+o2=oct2o2	1.70E+19	-2.5	0
5284.	c8h17-3+o2=oct3o2	1.80E+19	-2.5	0
5285.	c8h17-4+o2=oct4o2	1.80E+19	-2.5	0
5286.	oct1o2=oct1o2h3j	5.70E+08	1.0	25000
5287.	oct2o2=oct2o2h4j	5.70E+08	1.0	25000
5288.	oct3o2=oct3o2h1j	8.55E+08	1.0	28000
5289.	oct3o2=oct3o2h5j	5.70E+08	1.0	25000
5290.	oct4o2=oct4o2h2j	1.04E+09	1.0	25000
5291.	oct1o2h3j+o2=oct1o2h3o2	1.80E+19	-2.5	0
5292.	oct2o2h4j+o2=oct2o2h4o2	1.80E+19	-2.5	0
5293.	oct3o2h1j+o2=oct3o2h1o2	9.00E+18	-2.5	0
5294.	oct3o2h5j+o2=oct3o2h5o2	1.80E+19	-2.5	0
5295.	oct4o2h2j+o2=oct4o2h2o2	1.80E+19	-2.5	0
5296.	oct1o2h3o2=oct3o2h1*o+oh	4.06E+10	0.0	21860
5297.	oct2o2h4o2=oct4o2h2*o+oh	1.24E+11	0.0	19150
5298.	oct3o2h1o2=oct1o2h3*o+oh	4.06E+10	0.0	21860
5299.	oct3o2h5o2=oct5o2h3*o+oh	1.24E+11	0.0	19150
5300.	oct4o2h2o2=oct2o2h4*o+oh	1.24E+11	0.0	19150
5301.	oct3o2h1*o=>c5h11cho+ch2cho+oh	7.50E+15	0.0	44500
5302.	oct4o2h2*o=>nc4h9cho+ch3coch2+oh	7.50E+15	0.0	44500
5303.	oct1o2h3*o=>ch2o+nc5h11coch2+oh	7.50E+15	0.0	44500
5304.	oct5o2h3*o=>nc3h7cho+c2h5coch2+oh	7.50E+15	0.0	44500
5305.	oct2o2h4*o=>ch3cho+nc4h9coch2+oh	7.50E+15	0.0	44500
5306.	c6h13coco=>co+c6h13co	1.83E+15	-0.7	12910
5307.	c5h11coch2co=>co+nc5h11coch2	1.83E+15	-0.7	12910
5308.	nc4h9coc2h4co=>co+nc4h9coc2h4p	1.83E+15	-0.7	12910
5309.	nc3h7coc3h6co=>co+nc3h7coc3h6-1	1.83E+15	-0.7	12910
5310.	nc4h9coc2h4p=nc4h9co+c2h4	1.55E+17	-1.5	27840
5311.	nc4h9coc2h4p+o2=nc4h9coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0
5312.	nc4h9coc2h4o2+ho2=nc4h9coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5313.	nc4h9coc2h4o2h=nc4h9coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5314.	ch2o+nc4h9coch2=nc4h9coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900
5315.	nc3h7coc3h6-1=nc3h7coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000
5316.	nc3h7coc3h6-1+o2=nc3h7coc3h6o2-1	9.00E+18	-2.5	0
5317.	nc3h7coc3h6o2-1+ho2=nc3h7coc3h6o2h-1+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5318.	nc3h7coc3h6o2h-1=nc3h7coc3h6o-1+oh	1.50E+16	0.0	42500
5319.	ch2o+prcoetp=nc3h7coc3h6o-1	1.50E+11	0.0	11900
5320.	nc5h11coch2=c5h11-1+ch2co	1.00E+13	0.0	28000
5321.	nc5h11coch2+o2=nc5h11coch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5322.	nc5h11coch2o2+ho2=nc5h11coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5323.	nc5h11coch2o2h=nc5h11coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5324.	ch2o+c5h11co=nc5h11coch2o	1.50E+11	0.0	11900
5325.	c3h6coch3-1+o2=ch3coc3h6o2	9.00E+18	-2.5	0
5326.	ch2o+acetoch2=ch3coc3h6o	1.50E+11	0.0	11900
5327.	c3h6coch3-1=c2h4+ch3coch2	2.90E+16	-1.2	27000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	8600
5328.	c5h11chco+h=c6h13-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5329.	c5h11chco+oh=c6h13-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5330.	c5h11chco+o=c6h12-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5331.	c4h9chco+h=c5h11-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5332.	c4h9chco+oh=c5h11-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5333.	c4h9chco+o=c5h10-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5334.	c3h7chco+h=pc4h9+co	4.40E+12	0.0	1459
5335.	c3h7chco+oh=pc4h9+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5336.	c3h7chco+o=c4h8-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5337.	c2h3chco+h=c3h5-a+co	4.40E+12	0.0	1459
5338.	c2h3chco+oh=c3h5-a+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5339.	c2h3chco+o=c3h4-a+co2	3.20E+12	0.0	-437
5340.	c3h5chco+h=c4h7-4+co	4.40E+12	0.0	1459
5341.	c3h5chco+oh=c4h7-4+co2	3.73E+12	0.0	-1010

5342.	c3h5chco+o=c4h6+co2	3.20E+12	0.0	-437
5343.	c7h15-1=c7h15-2	1.00E+08	1.0	17400
5344.	c7h15-1=c7h15-3	1.70E+07	1.0	12000
5345.	c7h15-1=c7h15-4	9.90E+07	1.0	17300
5346.	c7h15-1=c2h4+c5h11-1	2.00E+13	0.0	28700
5347.	c7h15-2=c3h6+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700
5348.	c7h15-3=c4h8-1+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700
5349.	c7h15-3=c6h12-1+ch3	2.00E+13	0.0	31000
5350.	c7h15-4=c2h5+c5h10-1	4.00E+13	0.0	28700
5351.	c7h15-1=c7h14-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5352.	c7h15-2=c7h14-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5353.	c7h15-3=c7h14-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5354.	c7h15-4=c7h14-1+h	3.00E+13	0.0	38000
5355.	c7h15-1+o2=hept1o2	9.00E+18	-2.5	0
5356.	c7h15-2+o2=hept2o2	1.70E+19	-2.5	0
5357.	c7h15-3+o2=hept3o2	1.80E+19	-2.5	0
5358.	c7h15-4+o2=hept4o2	1.80E+19	-2.5	0
5359.	hept1o2=hept1o2h3j	1.70E+07	1.0	25000
5360.	hept2o2=hept2o2h4j	1.70E+07	1.0	25000
5361.	hept3o2=hept3o2h1j	2.50E+07	1.0	28000
5362.	hept3o2=hept3o2h5j	1.70E+07	1.0	25000
5363.	hept4o2=hept4o2h2j	1.70E+07	1.0	25000
5364.	hept1o2h3j+o2=hept1o2h3o2	1.80E+19	-2.5	0
5365.	hept2o2h4j+o2=hept2o2h4o2	1.80E+19	-2.5	0
5366.	hept3o2h1j+o2=hept3o2h1o2	9.00E+18	-2.5	0
5367.	hept3o2h5j+o2=hept3o2h5o2	1.80E+19	-2.5	0
5368.	hept4o2h2j+o2=hept4o2h2o2	1.80E+19	-2.5	0
5369.	hept1o2h3o2=hept3o2h1*o+oh	8.60E+06	1.0	23000
5370.	hept2o2h4o2=hept4o2h2*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5371.	hept3o2h1o2=hept1o2h3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5372.	hept3o2h5o2=hept5o2h3*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5373.	hept4o2h2o2=hept2o2h4*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5374.	hept3o2h1*o=>c2h5cho+nc3h7co+oh	1.00E+16	0.0	43000
5375.	hept4o2h2*o=>nc3h7cho+ch3coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5376.	hept1o2h3*o=>ch2o+nc4h9coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5377.	hept5o2h3*o=>c2h5cho+c2h5coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5378.	hept2o2h4*o=>ch3cho+nc3h7coch2+oh	1.00E+16	0.0	43000
5379.	c6h13-1+o2=hex1o2	9.00E+18	-2.5	0
5380.	c6h13-2+o2=hex2o2	1.70E+19	-2.5	0
5381.	hex1o2=hex1o2h5j	1.70E+07	1.0	25000
5382.	hex2o2=hex5o2h1j	2.50E+07	1.0	28000
5383.	hex1o2h5j+o2=hex1o2h5o2	1.80E+19	-2.5	0
5384.	hex5o2h1j+o2=hex5o2h1o2	1.80E+19	-2.5	0
5385.	hex1o2h5o2=hex5o2h1*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5386.	hex5o2h1o2=hex1o2h5*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5387.	hex5o2h1*o=>c3h6cho-1+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
5388.	hex1o2h5*o=>prcoch3-1+ch2o+oh	1.00E+16	0.0	43000
5389.	c5h11-1+o2=pent1o2	9.00E+18	-2.5	0
5390.	c5h11-2+o2=pent2o2	1.70E+19	-2.5	0
5391.	pent1o2=pent1o2h3j	1.70E+07	1.0	25000
5392.	pent2o2=pent2o2h4j	1.70E+07	1.0	25000
5393.	pent1o2h3j+o2=pent1o2h3o2	1.80E+19	-2.5	0
5394.	pent2o2h4j+o2=pent2o2h4o2	1.80E+19	-2.5	0
5395.	pent1o2h3o2=pent3o2h1*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5396.	pent2o2h4o2=pent4o2h2*o+oh	8.60E+06	1.0	20000
5397.	pent3o2h1*o=>ch2cho+c2h5cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
5398.	pent4o2h2*o=>ch3coch2+ch3cho+oh	1.00E+16	0.0	43000
5399.	pc4h9+o2=c4h9po2	9.00E+18	-2.5	0
5400.	c4h9po2=ic4h8ooh	9.90E+07	1.0	32500
5401.	c4h8-1+ho2=ic4h8ooh	1.50E+11	0.0	7800
5402.	ic4h8ooh+o2=io2c4h8ooh	1.05E+19	-2.5	0
5403.	io2c4h8ooh=ioohc4h8o+oh	9.90E+07	1.0	29500
5404.	ioohc4h8o=c2h5cho+hco+oh	1.50E+16	0.0	42000
5405.	c4h9po2=jc4h8ooh	1.70E+07	1.0	25000
5406.	jc4h8ooh+o2=jo2c4h8ooh	1.70E+19	-2.5	0
5407.	jo2c4h8ooh=joohc4h8o+oh	1.70E+07	1.0	23000
5408.	joohc4h8o=ch3cho+ch2cho+oh	1.50E+16	0.0	42000
5409.	c4h9po2=kc4h8ooh	4.35E+06	1.0	25000
5410.	kc4h8ooh+o2=ko2c4h8ooh	9.00E+18	-2.5	0
5411.	ko2c4h8ooh=koohc4h8o+oh	2.90E+06	1.0	20000
5412.	koohc4h8o=ch2o+c2h4cho+oh	1.50E+16	0.0	42000
5413.	mb4j3*o=>ch2co+me2j	1.00E+13	0.0	28000
5414.	hco+mp3j2*o=mb4*o2*o	1.00E+13	0.0	0
5415.	hco+mb4j3*o=mpe5*o3*o	1.00E+13	0.0	0
5416.	c7h14co+h=>c7h15-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5417.	c7h14co+oh=>c7h15-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5418.	c7h14co+o=>c7h14-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5419.	c7h12co+h=>c7h13+co	4.40E+12	0.0	1459

5420.	c7h12co+oh=>c7h13+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5421.	c7h12co+o=>c7h12+co2	3.20E+12	0.0	-437
5422.	c6h12co+h=>c6h13-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5423.	c6h12co+oh=>c6h13-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5424.	c6h12co+o=>c6h12-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5425.	c6h10co+h=>c6h1116+co	4.40E+12	0.0	1459
5426.	c6h10co+oh=>c6h1116+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5427.	c6h10co+o=>c6h1013+co2	3.20E+12	0.0	-437
5428.	c5h10co+h=>c5h11-1+co	4.40E+12	0.0	1459
5429.	c5h10co+oh=>c5h11-1+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5430.	c5h10co+o=>c5h10-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5431.	c5h8co+h=>c5h915+co	4.40E+12	0.0	1459
5432.	c5h8co+oh=>c5h915+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5433.	c5h8co+o=>c5h813+co2	3.20E+12	0.0	-437
5434.	c4h8co+h=>pc4h9+co	4.40E+12	0.0	1459
5435.	c4h8co+oh=>pc4h9+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5436.	c4h8co+o=>c4h8-1+co2	3.20E+12	0.0	-437
5437.	c4h6co+h=>c4h7-4+co	4.40E+12	0.0	1459
5438.	c4h6co+oh=>c4h7-4+co2	3.73E+12	0.0	-1010
5439.	c4h6co+o=>c4h6+co2	3.20E+12	0.0	-437
5440.	ch2cho+h=>ch3cho	2.00E+14	0.0	0
5441.	c9ald2oxo+o2=c7h15coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5442.	c9ald2oxo+oh=c7h15coco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5443.	c9ald2oxo+h=c7h15coco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5444.	c9ald2oxo+o=c7h15coco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5445.	c9ald2oxo+ho2=c7h15coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5446.	c9ald2oxo+ch3o=c7h15coco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5447.	c9ald2oxo+ch3o2=c7h15coco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5448.	c7h15coco=>c7h15co+co	1.83E+15	-0.7	12910
5449.	c9ald3oxo+o2=c6h13coch2co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5450.	c9ald3oxo+oh=c6h13coch2co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5451.	c9ald3oxo+h=c6h13coch2co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5452.	c9ald3oxo+o=c6h13coch2co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5453.	c9ald3oxo+ho2=c6h13coch2co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5454.	c9ald3oxo+ch3o=c6h13coch2co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5455.	c9ald3oxo+ch3o2=c6h13coch2co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5456.	c6h13coch2co=>c6h13coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5457.	c6h13coch2+o2=c6h13coch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5458.	c6h13coch2o2+ho2=c6h13coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5459.	c6h13coch2o2h=c6h13coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5460.	c6h13coch2o2+ch3o2=>c6h13coch2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5461.	ch2o+c6h13co=c6h13coch2o	1.50E+11	0.0	11900
5462.	c9ald4oxo+o2=c5h11coc2h4co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5463.	c9ald4oxo+oh=c5h11coc2h4co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5464.	c9ald4oxo+h=c5h11coc2h4co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5465.	c9ald4oxo+o=nc4h9coc2h6co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5466.	c9ald4oxo+ho2=c5h11coc2h4co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5467.	c9ald4oxo+ch3o=c5h11coc2h4co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5468.	c9ald4oxo+ch3o2=c5h11coc2h4co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5469.	c5h11coc2h4+o2=c5h11coc2h4o2	9.00E+18	-2.5	0
5470.	c5h11coc2h4o2+ho2=c5h11coc2h4o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5471.	c5h11coc2h4o2h=c5h11coc2h4o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5472.	c5h11coc2h4o2+ch3o2=>c5h11coc2h4o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5473.	ch2o+nc5h11coch2=c5h11coc2h4o	1.50E+11	0.0	11900
5474.	c5h11coc2h4co=>c5h11coc2h4+co	1.83E+15	-0.7	12910
5475.	c9ald5oxo+o2=nc4h9coc3h6co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5476.	c9ald5oxo+oh=nc4h9coc3h6co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5477.	c9ald5oxo+h=nc4h9coc3h6co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5478.	c9ald5oxo+o=nc4h9coc2h6co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5479.	c9ald5oxo+ho2=nc4h9coc3h6co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5480.	c9ald5oxo+ch3o=nc4h9coc3h6co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5481.	c9ald5oxo+ch3o2=nc4h9coc3h6co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5482.	nc4h9coc3h6co=>nc4h9coc3h6+co	1.83E+15	-0.7	12910
5483.	nc4h9coc3h6+o2=nc4h9coc3h6o2	9.00E+18	-2.5	0
5484.	nc4h9coc3h6o2+ho2=nc4h9coc3h6o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5485.	nc4h9coc3h6o2h=nc4h9coc3h6o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5486.	nc4h9coc3h6o2+ch3o2=>nc4h9coc3h6o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5487.	ch2o+nc4h9coc2h4p=nc4h9coc3h6o	1.50E+11	0.0	11900
5488.	c8ald2oxo+o2=c6h13coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5489.	c8ald2oxo+oh=c6h13coco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5490.	c8ald2oxo+h=c6h13coco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5491.	c8ald2oxo+o=c6h13coco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5492.	c8ald2oxo+ho2=c6h13coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5493.	c8ald2oxo+ch3o=c6h13coco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5494.	c8ald2oxo+ch3o2=c6h13coco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5495.	c8ald3oxo+o2=c5h11coch2co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5496.	c8ald3oxo+oh=c5h11coch2co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5497.	c8ald3oxo+h=c5h11coch2co+h2	4.00E+13	0.0	4200

5498.	c8ald3oxo+o=c5h11coch2co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5499.	c8ald3oxo+ho2=c5h11coch2co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5500.	c8ald3oxo+ch3o=c5h11coch2co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5501.	c8ald3oxo+ch3o2=c5h11coch2co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5502.	c8ald4oxo+o2=nc4h9coc2h4co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5503.	c8ald4oxo+oh=nc4h9coc2h4co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5504.	c8ald4oxo+h=nc4h9coc2h4co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5505.	c8ald4oxo+o=nc4h9coc2h4co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5506.	c8ald4oxo+ho2=nc4h9coc2h4co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5507.	c8ald4oxo+ch3o=nc4h9coc2h4co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5508.	c8ald4oxo+ch3o2=nc4h9coc2h4co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5509.	c8ald5oxo+o2=nc3h7coc3h6co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5510.	c8ald5oxo+oh=nc3h7coc3h6co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5511.	c8ald5oxo+h=nc3h7coc3h6co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5512.	c8ald5oxo+o=nc3h7coc3h6co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5513.	c8ald5oxo+ho2=nc3h7coc3h6co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5514.	c8ald5oxo+ch3o=nc3h7coc3h6co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5515.	c8ald5oxo+ch3o2=nc3h7coc3h6co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5516.	c7ald4oxo+o2=prcoetco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5517.	c7ald4oxo+oh=prcoetco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5518.	c7ald4oxo+h=prcoetco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5519.	c7ald4oxo+o=prcoetco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5520.	c7ald4oxo+ho2=prcoetco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5521.	c7ald4oxo+ch3o=prcoetco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5522.	c7ald4oxo+ch3o2=prcoetco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5523.	c7ald3oxo+o2=bucomeco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5524.	c7ald3oxo+oh=bucomeco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5525.	c7ald3oxo+h=bucomeco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5526.	c7ald3oxo+o=bucomeco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5527.	c7ald3oxo+ho2=bucomeco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5528.	c7ald3oxo+ch3o=bucomeco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5529.	c7ald3oxo+ch3o2=bucomeco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5530.	c6ald5oxo+o2=mecoprrco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5531.	c6ald5oxo+oh=mecoprrco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5532.	c6ald5oxo+h=mecoprrco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5533.	c6ald5oxo+o=mecoprrco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5534.	c6ald5oxo+ho2=mecoprrco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5535.	c6ald5oxo+ch3o=mecoprrco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5536.	c6ald5oxo+ch3o2=mecoprrco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5537.	c6ald4oxo+o2=etcoetco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5538.	c6ald4oxo+oh=etcoetco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5539.	c6ald4oxo+h=etcoetco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5540.	c6ald4oxo+o=etcoetco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5541.	c6ald4oxo+ho2=etcoetco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5542.	c6ald4oxo+ch3o=etcoetco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5543.	c6ald4oxo+ch3o2=etcoetco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5544.	c6ald3oxo+o2=prcomeco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5545.	c6ald3oxo+oh=prcomeco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5546.	c6ald3oxo+h=prcomeco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5547.	c6ald3oxo+o=prcomeco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5548.	c6ald3oxo+ho2=prcomeco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5549.	c6ald3oxo+ch3o=prcomeco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5550.	c6ald3oxo+ch3o2=prcomeco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5551.	c5ald4oxo+o2=mecoetco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5552.	c5ald4oxo+oh=mecoetco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5553.	c5ald4oxo+h=mecoetco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5554.	c5ald4oxo+o=mecoetco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5555.	c5ald4oxo+ho2=mecoetco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5556.	c5ald4oxo+ch3o=mecoetco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5557.	c5ald4oxo+ch3o2=mecoetco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5558.	c5ald3oxo+o2=etcomeco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5559.	c5ald3oxo+oh=etcomeco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5560.	c5ald3oxo+h=etcomeco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5561.	c5ald3oxo+o=etcomeco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5562.	c5ald3oxo+ho2=etcomeco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5563.	c5ald3oxo+ch3o=etcomeco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5564.	c5ald3oxo+ch3o2=etcomeco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5565.	c5ald2oxo+o2=prcoco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5566.	c5ald2oxo+oh=prcoco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5567.	c5ald2oxo+h=prcoco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5568.	c5ald2oxo+o=prcoco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5569.	c5ald2oxo+ho2=prcoco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5570.	c5ald2oxo+ch3o=prcoco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5571.	c5ald2oxo+ch3o2=prcoco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5572.	c4ald3oxo+o2=mecomeco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5573.	c4ald3oxo+oh=mecomeco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5574.	c4ald3oxo+h=mecomeco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5575.	c4ald3oxo+o=mecomeco+oh	5.00E+12	0.0	1790

5576.	c4ald3oxo+ho2=mecomeco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5577.	c4ald3oxo+ch3o=mecomeco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5578.	c4ald3oxo+ch3o2=mecomeco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5579.	c4ald2oxo+o2=c2h5coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5580.	c4ald2oxo+oh=c2h5coco+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5581.	c4ald2oxo+h=c2h5coco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5582.	c4ald2oxo+o=c2h5coco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5583.	c4ald2oxo+ho2=c2h5coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5584.	c4ald2oxo+ch3o=c2h5coco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5585.	c4ald2oxo+ch3o2=c2h5coco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5586.	bucomeco=>nc4h9coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5587.	mecoprco=>ch3coc3h6+co	1.83E+15	-0.7	12910
5588.	prcoetco=>nprcoetp+co	1.83E+15	-0.7	12910
5589.	prcomeco=>nc3h7coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5590.	etcoetco=etcoetp+co	1.83E+15	-0.7	12910
5591.	etcomeco=>c2h5coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5592.	mecoetco=>acetoch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5593.	mecomeco=>ch3coch2+co	1.83E+15	-0.7	12910
5594.	prcoco=>nc3h7co+co	1.83E+15	-0.7	12910
5595.	co+c2h5co=c2h5coco	1.50E+11	0.0	3000
5596.	choch2cho+o2=choch2co+ho2	4.00E+13	0.5	42200
5597.	choch2cho+oh=choch2co+h2o	5.40E+10	0.8	-340
5598.	choch2cho+h=choch2co+h2	8.00E+13	0.0	4200
5599.	choch2cho+o=choch2co+oh	1.00E+13	0.0	1790
5600.	choch2cho+ho2=choch2co+h2o2	5.60E+12	0.0	13600
5601.	choch2cho+ch3o=choch2co+ch3oh	2.30E+11	0.0	1280
5602.	choch2cho+ch3o2=choch2co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	9500
5603.	choch2co=>ch2cho+co	1.83E+15	-0.7	12910
5604.	choc2h4cho+o2=choc2h4co+ho2	4.00E+13	0.5	42200
5605.	choc2h4cho+oh=choc2h4co+h2o	5.40E+10	0.8	-340
5606.	choc2h4cho+h=choc2h4co+h2	8.00E+13	0.0	4200
5607.	choc2h4cho+o=choc2h4co+oh	1.00E+13	0.0	1790
5608.	choc2h4cho+ho2=choc2h4co+h2o2	5.60E+12	0.0	13600
5609.	choc2h4cho+ch3o=choc2h4co+ch3oh	2.30E+11	0.0	1280
5610.	choc2h4cho+ch3o2=choc2h4co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	9500
5611.	choc2h4co=>c2h4cho+co	1.83E+15	-0.7	12910
5612.	choc3h6cho+o2=choc3h6co+ho2	4.00E+13	0.5	42200
5613.	choc3h6cho+oh=choc3h6co+h2o	5.40E+10	0.8	-340
5614.	choc3h6cho+h=choc3h6co+h2	8.00E+13	0.0	4200
5615.	choc3h6cho+o=choc3h6co+oh	1.00E+13	0.0	1790
5616.	choc3h6cho+ho2=choc3h6co+h2o2	5.60E+12	0.0	13600
5617.	choc3h6cho+ch3o=choc3h6co+ch3oh	2.30E+11	0.0	1280
5618.	choc3h6cho+ch3o2=choc3h6co+ch3o2h	2.00E+12	0.0	9500
5619.	choc3h6co=>c3h6cho-1+co	1.83E+15	-0.7	12910
5620.	ch3coc3h6+o2=ch3coc3h6o2	9.00E+18	-2.5	0
5621.	ch3coc3h6o2+ho2=ch3coc3h6o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5622.	ch3coc3h6o2h=ch3coc3h6o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5623.	ch3coc3h6=c2h4+ch3coch2	2.90E+16	-1.2	27000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+11	0.0	8600
5624.	co2+nc3h7co=peaoj2*o	1.00E+11	0.0	30850
5625.	co2+nc4h9co=hxaoj2*o	1.00E+11	0.0	30850
5626.	co2+c5h11co=hpaoj2*o	1.00E+11	0.0	30850
5627.	co2+c6h13co=oaoj2*o	1.00E+11	0.0	30850
5628.	c7h14-1=c3h5-a+pc4h9	7.94E+15	0.0	70740
5629.	c7h14-1+oh=c7h13+h2o	3.00E+06	2.0	-1520
5630.	c7h14-1+h=c7h13+h2	5.40E+04	2.5	-1900
5631.	c7h14-1+ho2=c7h13+h2o2	6.40E+04	2.6	12400
5632.	c7h14-1+o=c7h13+oh	8.80E+10	0.7	3250
5633.	c7h13=c7h13a	2.50E+07	1.0	24500
5634.	c7h13=c7h13b	9.90E+07	1.0	27300
5635.	c7h13=c4h6+nc3h7	1.30E+13	0.0	35900
5636.	c7h13a=c2h4+c5h915	2.00E+13	0.0	28700
5637.	c7h13b=c3h6+c4h7-4	2.00E+13	0.0	28700
5638.	c6h13cho+oh=c6h13co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
5639.	c6h13cho+h=c6h13co+h2	4.00E+13	0.0	4200
5640.	c6h13cho+o=c6h13co+oh	5.00E+12	0.0	1790
5641.	c6h13cho+ho2=c6h13co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5642.	c6h13cho+ch3=c6h13co+ch4	1.70E+12	0.0	8440
5643.	c6h13cho+ch3o=c6h13co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5644.	c6h13cho+ch3o2=c6h13co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5645.	c6h13cho+oh=c6h12cho-1+h2o	5.27E+09	1.0	1586
5646.	c6h13cho+oh=c6h12cho-2+h2o	4.67E+07	1.6	-35
5647.	c6h13cho+oh=c6h12cho-3+h2o	4.67E+07	1.6	-35
5648.	c6h13cho+oh=c6h12cho-4+h2o	4.67E+07	1.6	-35
5649.	c6h13cho+oh=c6h12cho-5+h2o	4.67E+07	1.6	-35
5650.	c6h13cho+oh=c6h12cho-6+h2o	2.70E+09	1.0	-149
5651.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-1+h2o2	9.03E-01	3.6	7153
5652.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-2+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
5653.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-3+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
5654.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-4+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
5655.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-5+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
5656.	c6h13cho+ho2=c6h12cho-6+h2o2	3.61E+03	2.5	10530
5657.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-1+ch3o2h	6.03E+12	0.0	19380
5658.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
5659.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-3+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
5660.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-4+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
5661.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-5+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
5662.	c6h13cho+ch3o2=c6h12cho-6+ch3o2h	9.63E+03	2.6	11510
5663.	c6h13co=>c6h13-1+co	1.83E+15	-0.7	12910
5664.	c7h15co=>c7h15-1+co	1.83E+15	-0.7	12910
5665.	c6h12cho-6=c2h3cho+pc4h9	7.40E+11	0.0	21970
5666.	c6h12cho-5=c6h12-1+hco	8.25E+12	-0.2	21900
5667.	c6h12cho-5=nc3h7+ac3h5cho	2.00E+13	0.0	28700
5668.	c6h12cho-4=c5h10-1+ch2cho	7.40E+11	0.0	21970
5669.	c6h12cho-4=c2h5+c4h6+ch2o	1.00E+13	0.0	28700
5670.	c6h12cho-3=ch3+c4h6+ch3cho	3.17E+14	-0.4	29900
5671.	c6h12cho-3=c4h8-1+c2h4cho	8.25E+12	-0.2	21900
5672.	c6h12cho-2=c3h6+c3h6cho-1	7.40E+11	0.0	21970
5673.	c6h12cho-1=c2h4+c4h8cho-1	7.40E+11	0.0	21970
5674.	c5h11cocho+o2=c5h11coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5675.	c5h11cocho+oh=c5h11coco+h2o	1.00E+13	0.0	0
5676.	c5h11cocho+h=c5h11coco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5677.	c5h11cocho+o=c5h11coco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5678.	c5h11cocho+ho2=c5h11coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5679.	c5h11cocho+ch3=c5h11coco+ch4	1.70E+12	0.0	8440
5680.	c5h11cocho+ch3o=c5h11coco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5681.	c5h11cocho+ch3o2=c5h11coco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5682.	c5h11coco=c5h11co+co	1.83E+15	-0.7	12910
5683.	c4h9cocho+o2=c4h9coco+ho2	2.00E+13	0.5	42200
5684.	c4h9cocho+oh=c4h9coco+h2o	1.00E+13	0.0	0
5685.	c4h9cocho+h=c4h9coco+h2	4.00E+13	0.0	4200
5686.	c4h9cocho+o=c4h9coco+oh	5.00E+12	0.0	1790
5687.	c4h9cocho+ho2=c4h9coco+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
5688.	c4h9cocho+ch3=c4h9coco+ch4	1.70E+12	0.0	8440
5689.	c4h9cocho+ch3o=c4h9coco+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
5690.	c4h9cocho+ch3o2=c4h9coco+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
5691.	c4h9coco=nc4h9co+co	1.83E+15	-0.7	12910
5692.	nc4h10=nc3h7+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
5693.	nc4h10=c2h5+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
5694.	nc4h10+h=pc4h9+h2	1.88E+05	2.8	6280
5695.	nc4h10+h=sc4h9+h2	2.60E+06	2.4	4471
5696.	nc4h10+o=pc4h9+oh	1.93E+05	2.7	3716
5697.	nc4h10+o=sc4h9+oh	9.54E+04	2.7	2106
5698.	nc4h10+oh=pc4h9+h2o	1.05E+10	1.0	1590
5699.	nc4h10+oh=sc4h9+h2o	9.36E+07	1.6	-35
5700.	nc4h10+ho2=pc4h9+h2o2	1.68E+13	0.0	20440
5701.	nc4h10+ho2=sc4h9+h2o2	1.12E+13	0.0	17690
5702.	nc4h10+ch3=pc4h9+ch4	9.04E-01	3.6	7154
5703.	nc4h10+ch3=sc4h9+ch4	5.41E+04	2.3	7287
5704.	nc4h10+ch3o=pc4h9+ch3oh	2.16E+11	0.0	7000
5705.	nc4h10+ch3o=sc4h9+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
5706.	nc5h12=pc4h9+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
5707.	nc5h12=nc3h7+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
5708.	nc5h12+h=c5h11-1+h2	1.88E+05	2.8	6280
5709.	nc5h12+h=c5h11-2+h2	2.60E+06	2.4	4471
5710.	nc5h12+o=c5h11-1+oh	1.93E+05	2.7	3716
5711.	nc5h12+o=c5h11-2+oh	9.54E+04	2.7	2106
5712.	nc5h12+oh=c5h11-1+h2o	1.05E+10	1.0	1590
5713.	nc5h12+oh=c5h11-2+h2o	9.36E+07	1.6	-35
5714.	nc5h12+ho2=c5h11-1+h2o2	1.68E+13	0.0	20440
5715.	nc5h12+ho2=c5h11-2+h2o2	1.12E+13	0.0	17690
5716.	nc5h12+ch3=c5h11-1+ch4	9.04E-01	3.6	7154
5717.	nc5h12+ch3=c5h11-2+ch4	5.41E+04	2.3	7287
5718.	nc5h12+ch3o=c5h11-1+ch3oh	2.16E+11	0.0	7000
5719.	nc5h12+ch3o=c5h11-2+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
5720.	nc6h14=c5h11-1+ch3	7.90E+22	-1.8	88630
5721.	nc6h14=pc4h9+c2h5	1.58E+17	0.0	87040
5722.	nc6h14=nc3h7+nc3h7	1.58E+17	0.0	87040
5723.	nc6h14+h=c6h13-1+h2	1.88E+05	2.8	6280
5724.	nc6h14+h=c6h13-2+h2	2.60E+06	2.4	4471
5725.	nc6h14+h=c6h13-3+h2	2.60E+06	2.4	4471
5726.	nc6h14+o=c6h13-1+oh	1.93E+05	2.7	3716
5727.	nc6h14+o=c6h13-2+oh	9.54E+04	2.7	2106
5728.	nc6h14+o=c6h13-3+oh	9.54E+04	2.7	2106
5729.	nc6h14+oh=c6h13-1+h2o	1.05E+10	1.0	1590
5730.	nc6h14+oh=c6h13-2+h2o	9.36E+07	1.6	-35
5731.	nc6h14+oh=c6h13-3+h2o	9.36E+07	1.6	-35
5732.	nc6h14+ho2=c6h13-1+h2o2	1.68E+13	0.0	20440
5733.	nc6h14+ho2=c6h13-2+h2o2	1.12E+13	0.0	17690
5734.	nc6h14+ho2=c6h13-3+h2o2	1.12E+13	0.0	17690
5735.	nc6h14+ch3=c6h13-1+ch4	9.04E-01	3.6	7154
5736.	nc6h14+ch3=c6h13-2+ch4	5.41E+04	2.3	7287
5737.	nc6h14+ch3=c6h13-3+ch4	5.41E+04	2.3	7287
5738.	nc6h14+ch3o=c6h13-1+ch3oh	2.16E+11	0.0	7000
5739.	nc6h14+ch3o=c6h13-2+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
5740.	nc6h14+ch3o=c6h13-3+ch3oh	2.19E+11	0.0	5000
5741.	c4h9po2+ho2=pc4h9o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5742.	c4h9po2+ch3o2=>pc4h9o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5743.	pc4h9o2h=pc4h9o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5744.	ch2o+nc3h7=pc4h9o	1.50E+11	0.0	11900
5745.	pent1o2+ho2=pent1o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5746.	pent1o2+ch3o2=>pent1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5747.	pent1o2h=pent1o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5748.	ch2o+pc4h9=pent1o	1.50E+11	0.0	11900
5749.	ch3coch2+o2=acetoo2	9.00E+18	-2.5	0
5750.	acetoo2+ho2=acetoo2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5751.	acetoo2h=acetoo+oh	1.50E+16	0.0	42500
5752.	acetoo2+ch3o2=>acetoo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5753.	ch2o+ch3co=acetoo	1.50E+11	0.0	11900
5754.	hept1o2+ho2=hept1o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5755.	hept1o2h=hept1o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5756.	hept1o2+ch3o2=>hept1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5757.	ch2o+c6h13-1=hept1o	1.50E+11	0.0	11900
5758.	hex1o2+ho2=hex1o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5759.	hex1o2h=hex1o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5760.	hex1o2+ch3o2=>hex1o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5761.	ch2o+c5h11-1=hex1o	1.50E+11	0.0	11900
5762.	nprcoetp+o2=nprcoetpo2	9.00E+18	-2.5	0
5763.	nprcoetpo2+ho2=nprcoetpo2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5764.	nprcoetpo2h=nprcoetpo+oh	1.50E+16	0.0	42500
5765.	nprcoetpo2+ch3o2=>nprcoetpo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5766.	ch2o+nc3h7coch2=nprcoetpo	1.50E+11	0.0	11900
5767.	nc4h9coch2=pc4h9+ch2co	1.00E+13	0.0	28000
5768.	nc4h9coch2+o2=nc4h9coch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5769.	nc4h9coch2o2+ho2=nc4h9coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5770.	nc4h9coch2o2h=nc4h9coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5771.	nc4h9coch2o2+ch3o2=>nc4h9coch2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5772.	ch2o+nc4h9co=nc4h9coch2o	1.50E+11	0.0	11900
5773.	acetoch2+o2=acetoch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5774.	acetoch2o2+ho2=acetoch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5775.	acetoch2o2h=acetoch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5776.	acetoch2o2+ch3o2=>acetoch2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5777.	ch2o+ch3coch2=acetoch2o	1.50E+11	0.0	11900
5778.	c2h5coch2+o2=c2h5coch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5779.	c2h5coch2o2+ho2=c2h5coch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5780.	c2h5coch2o2h=c2h5coch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5781.	c2h5coch2o2+ch3o2=>c2h5coch2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5782.	ch2o+c2h5co=c2h5coch2o	1.50E+11	0.0	11900
5783.	prcoch3-1+o2=o2prcoch3	9.00E+18	-2.5	0
5784.	o2prcoch3+ho2=ho2prcoch3+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5785.	ho2prcoch3=oprcoch3+oh	1.50E+16	0.0	42500
5786.	o2prcoch3+ch3o2=>oprcoch3+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5787.	ch2o+acetoch2=oprcoch3	1.50E+11	0.0	11900
5788.	etcoetp+o2=etcoeto2	9.00E+18	-2.5	0
5789.	etcoeto2+ho2=etcoeto2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5790.	etcoeto2h=etcoeto+oh	1.50E+16	0.0	42500
5791.	etcoeto2+ch3o2=>etcoeto+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5792.	ch2o+c2h5coch2=etcoeto	1.50E+11	0.0	11900
5793.	nc3h7coch2+o2=prcoch2o2	9.00E+18	-2.5	0
5794.	prcoch2o2+ho2=prcoch2o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5795.	prcoch2o2h=prcoch2o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5796.	prcoch2o2+ch3o2=>prcoch2o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5797.	ch2o+nc3h7co=prcoch2o	1.50E+11	0.0	11900
5798.	prcoet-1+o2=prcoet-1o2	9.00E+18	-2.5	0
5799.	prcoet-1o2+ho2=prcoet-1o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5800.	prcoet-1o2h=prcoet-1o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5801.	ch2o+etcoetp=prcoet-1o	1.50E+11	0.0	11900
5802.	mp2dmj+o2=mp2dmoo	9.00E+18	-2.5	0
5803.	mp2dmoo+ho2=mp2dmooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5804.	mp2dmooh=mp2dmo+oh	1.50E+16	0.0	42500
5805.	mp2dmoo+ch3o2=>mp2dmo+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5806.	ch2o+c2h3co2=mp2dmo	1.50E+11	0.0	11900
5807.	c2h4cho+o2=>o2c2h4cho	9.00E+18	-2.5	0
5808.	o2c2h4cho+ho2=>c3ket13+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5809.	o2c2h4cho+ch3o2=>oc2h4cho+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
5810.	ch2o+ch2cho=oc2h4cho	1.50E+11	0.0	11900
5811.	c2h5coc3h6=c2h5coch2+c2h4	2.00E+13	0.0	27000
5812.	c2h5coc3h6+o2=c2h5coc3h6o2	9.00E+18	-2.5	0
5813.	c2h5coc3h6o2+ho2=c2h5coc3h6o2h+o2	2.29E+11	0.0	-1790
5814.	c2h5coc3h6o2h=c2h5coc3h6o+oh	1.50E+16	0.0	42500
5815.	ch2o+etcoetp=c2h5coc3h6o	1.50E+11	0.0	11900
5816.	c2h2+m=c2h+h+m	4.20E+16	0.0	107000
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.13E+07	2.1	-28910
5817.	o+c2h2=c2h+oh	3.16E+15	-0.6	15000
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.44E+10	0.5	-15570
5818.	hcco+oh=hco+hco	1.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	4.82E+13	0.0	40360
5819.	ch3o+ch3oh=ch2oh+ch3oh	3.00E+11	0.0	4074
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.55E+05	1.7	10500
5820.	c2h5oh+o2=pc2h4oh+ho2	2.00E+13	0.0	52800
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.47E+08	0.3	-1105
5821.	c2h5oh+o2=ch3choh+ho2	1.50E+13	0.0	50150
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.08E+09	0.6	-504
5822.	c2h5oh+c2h5=pc2h4oh+c2h6	5.00E+10	0.0	13400
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+10	0.0	26990
5823.	c2h5oh+c2h5=ch3choh+c2h6	5.00E+10	0.0	10400
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.00E+10	0.0	2
5824.	c2h2+ch3=c3h4-a+h	6.74E+19	-2.1	31590
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.15E+16	-0.7	15790
5825.	c3h6+o=ch2co+ch3+h	2.50E+07	1.8	76
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+00	0.0	0
5826.	c3h6+o=ch3chco+h+h	2.50E+07	1.8	76
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0
5827.	ch2o+m=co+h2+m	1.83E+32	-4.4	87120
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.07E+27	-3.4	84350
5828.	c2h4+ch3o=c2h3+ch3oh	1.20E+11	0.0	6750
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+10	0.0	9000
5829.	ch3coch3+ch3o=ch3coch2+ch3oh	1.00E+11	0.0	7000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+10	0.0	9000
5830.	c2h5co=c2h5+co	1.83E+15	-0.7	12910
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.51E+11	0.0	4810
5831.	ch3co+h=ch2co+h2	2.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.27E+09	0.0	83040
5832.	ch3co+o=ch2co+oh	2.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.27E+09	0.0	83040
5833.	ch3co+ch3=ch2co+ch4	5.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	7.27E+09	0.0	83040
5834.	c2h6+ch=c2h5+ch2	1.10E+14	0.0	-260
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.83E+10	0.6	440
5835.	ch2oh+co=ch3oh+hco	1.29E-01	4.6	6596
	Reverse Arrhenius coefficients:	9.63E+03	2.9	13110
5836.	c3h2+o2=hcco+co+h	5.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	0.00E+00	0.0	0
5837.	c3h5o+o2=c2h3cho+ho2	1.00E+12	0.0	6000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.29E+11	0.0	32000
5838.	c3h6o1-2=c2h4+ch2o	6.00E+14	0.0	60000
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.97E+11	0.0	50000
5839.	c2h4o1,2+ch3o=c2h3o1,2+ch3oh	1.20E+11	0.0	6750
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.61E+09	-0.9	25480
5840.	c3h6o1-3=c2h4+ch2o	6.00E+14	0.0	60000
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.97E+11	0.0	31080
5841.	c2h5cho+ch3ch2o=c2h5co+c2h5oh	6.03E+11	0.0	3300
	Reverse Arrhenius coefficients:	3.02E+11	0.0	18160
5842.	c3h4-a+ho2=c2h4+co+oh	1.00E+12	0.0	14000
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+00	0.0	0
5843.	ch3cho+oh=ch3+hocho	3.00E+15	-1.1	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	5.35E+19	-1.7	119800
5844.	c3h5-t+o2=c3h4-a+ho2	1.89E+30	-5.6	15540
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.57E+31	-5.8	26610
5845.	c3h5-t=c2h2+ch3	2.16E+10	-8.3	45110
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.61E+10	-8.6	20330
5846.	c3h5-a+c2h5=c2h4+c3h6	4.00E+11	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	6.94E+16	-1.3	52800
5847.	c3h4-a+c3h6=c3h5-a+c3h5-a	8.39E+17	-1.3	33690
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.00E+12	0.0	0
5848.	c3h5-t+o2=ch3coch2+o	3.81E+17	-1.4	5580
	Reverse Arrhenius coefficients:	2.00E+11	0.0	17500
5849.	c3h5-t+ch3=c3h4-p+ch4	1.00E+11	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.68E+16	-0.9	71530
5850.	c3h4-a+c2h=c3h3+c2h2	1.00E+13	0.0	0
	Reverse Arrhenius coefficients:	1.42E+16	-1.4	53820
5851.	c3h4-p+o=c3h3+oh	7.65E+08	1.5	8600

```
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.18E+08   1.3    22470
5852. c3h4-p+c3h5-a=c3h3+c3h6                    1.00E+12   0.0     7700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.93E+16  -1.7    37950
5853. c3h3+ch3=c2h5+c2h                          4.56E+17  -1.1    48730
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.81E+13   0.0        0
5854. c2h3o1,2=ch2cho                            1.00E+14   0.0    14000
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.23E+11   1.7    28300
5855. ocho+m=h+co2+m                             2.44E+15  -0.5    26500
        Reverse Arrhenius coefficients:          7.50E+13   0.0    29000
5856. hcco+o2=co2+hco                            2.40E+11   0.0     -854
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.47E+14   0.0   133600
5857. ic3h7+oh=c3h6+h2o                          2.41E+13   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.98E+12   0.6    83820
5858. c3h5oh+ho2=ch2cch2oh+h2o2                  1.76E+09   0.3    22590
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.01E+09   0.0     2583
5859. c3h5oh+oh=ch2cch2oh+h2o                    5.06E+12   0.0     5960
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.46E+12   0.1    17410
5860. c3h5oh+h=ch2cch2oh+h2                      3.90E+05   2.5     5821
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.59E+04   2.5     2121
5861. c3h5oh+o2=ch2cch2oh+ho2                    4.00E+13   0.0    60690
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.83E+10   0.4     -492
5862. c3h5oh+ch3=ch2cch2oh+ch4                   2.40E+11   0.0     8030
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.17E+11   0.1     4810
5863. c3h5oh=ch2cch2oh+h                         2.83E+19  -1.1   111100
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+14   0.0        0
5864. ch2cch2oh+o2=ch2oh+co+ch2o                 4.33E+12   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5865. ch2cch2oh=c2h2+ch2oh                       2.16E+40  -8.3    45110
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.61E+40  -8.6    20330
5866. ch2cch2oh=c3h4-a+oh                        6.70E+16  -1.1    42580
        Reverse Arrhenius coefficients:          8.50E+12   0.0     2000
5867. nc3h7cho+o2=nc3h7co+ho2                    2.00E+13   0.5    42200
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+07   0.5     4000
5868. nc3h7cho+oh=nc3h7co+h2o                    1.00E+13   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.00E+13   0.0    37000
5869. nc3h7cho+h=nc3h7co+h2                      4.00E+13   0.0     4200
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.80E+13   0.0    24000
5870. nc3h7cho+o=nc3h7co+oh                      5.00E+12   0.0     1790
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12   0.0    19000
5871. nc3h7cho+ho2=nc3h7co+h2o2                  2.80E+12   0.0    13600
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+12   0.0    10000
5872. nc3h7cho+ch3=nc3h7co+ch4                   1.70E+12   0.0     8440
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.50E+13   0.0    28000
5873. nc3h7cho+ch3o=nc3h7co+ch3oh                1.15E+11   0.0     1280
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.00E+11   0.0    18000
5874. nc3h7cho+ch3o2=nc3h7co+ch3o2h              1.00E+12   0.0     9500
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.50E+10   0.0    10000
5875. nc3h7cho+oh=c3h6cho-1+h2o                  5.27E+09   1.0     1586
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.09E+09   1.0    21020
5876. nc3h7cho+oh=c3h6cho-2+h2o                  4.67E+07   1.6      -35
        Reverse Arrhenius coefficients:          8.06E+05   1.9    21940
5877. nc3h7cho+oh=c3h6cho-3+h2o                  2.70E+09   1.0     -149
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.19E+10   0.8    28740
5878. nc3h7cho+ho2=c3h6cho-1+h2o2                9.03E-01   3.6     7153
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.11E+00   3.3    -4874
5879. nc3h7cho+ho2=c3h6cho-2+h2o2                1.47E+04   2.6    13910
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.51E+03   2.6     4424
5880. nc3h7cho+ho2=c3h6cho-3+h2o2                3.61E+03   2.5    10530
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.92E+05   2.0     7954
5881. nc3h7cho+ch3o2=c3h6cho-1+ch3o2h            6.03E+12   0.0    19380
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.04E+13  -0.5     6628
5882. nc3h7cho+ch3o2=c3h6cho-2+ch3o2h            9.63E+03   2.6    13910
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.05E+03   2.4     3704
5883. nc3h7cho+ch3o2=c3h6cho-3+ch3o2h            9.63E+03   2.6    11510
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.39E+06   1.8     8212
5884. nc3h7co=nc3h7+co                           5.32E+15  -0.9    13400
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.50E+11   0.0     4800
5885. c2h5coch3+oh=acetoch2+h2o                  7.55E+09   1.0     1586
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.53E+09   1.0    21020
5886. c2h5coch3+oh=ch3chcoch3+h2o                8.45E+11   0.0     -228
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.59E+13  -0.2    28620
5887. c2h5coch3+oh=c2h5coch2+h2o                 5.10E+11   0.0     1192
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.63E+13  -0.7    27670
5888. c2h5coch3+ho2=acetoch2+h2o2                2.38E+04   2.5    16490
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.86E+04   2.2     4459
5889. c2h5coch3+ho2=ch3chcoch3+h2o2              2.00E+11   0.0     8698
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.23E+13  -0.6     6080
5890. c2h5coch3+ho2=c2h5coch2+h2o2               2.38E+04   2.5    14690
```

```
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.84E+07   1.5     9702
5891. c2h5coch3+o=acetoch2+oh                    2.25E+13   0.0     7700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.62E+11   0.0     9882
5892. c2h5coch3+o=ch3chcoch3+oh                  3.07E+13   0.0     3400
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.85E+13  -0.2    15000
5893. c2h5coch3+o=c2h5coch2+oh                   5.00E+12   0.0     5962
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.59E+13  -0.7    15190
5894. c2h5coch3+h=acetoch2+h2                    9.16E+06   2.0     7700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.28E+05   2.0    11980
5895. c2h5coch3+h=ch3chcoch3+h2                  4.46E+06   2.0     3200
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.93E+07   1.8    16890
5896. c2h5coch3+h=c2h5coch2+h2                   9.30E+12   0.0     6357
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.79E+14  -0.7    17680
5897. c2h5coch3+o2=acetoch2+ho2                  2.05E+13   0.0    51310
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.74E+10   0.3    -1895
5898. c2h5coch3+o2=ch3chcoch3+ho2                1.55E+13   0.0    41970
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.22E+12   0.1    -1822
5899. c2h5coch3+o2=c2h5coch2+ho2                 2.05E+13   0.0    49150
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.12E+13  -0.4     2988
5900. c2h5coch3+ch3=acetoch2+ch4                 3.19E+01   3.2     7172
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.89E+01   3.2    11930
5901. c2h5coch3+ch3=ch3chcoch3+ch4               1.74E+00   3.5     3680
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.97E+02   3.2    17850
5902. c2h5coch3+ch3=c2h5coch2+ch4                1.62E+11   0.0     9630
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.27E+14  -0.7    21430
5903. c2h5coch3+ch3o=acetoch2+ch3oh              2.17E+11   0.0     6460
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.89E+09   0.0     9007
5904. c2h5coch3+ch3o=ch3chcoch3+ch3oh            1.45E+11   0.0     2771
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.03E+11  -0.2    14730
5905. c2h5coch3+ch3o=c2h5coch2+ch3oh             2.17E+11   0.0     4660
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.14E+12  -0.7    14250
5906. c2h5coch3+ch3o2=acetoch2+ch3o2h            3.01E+12   0.0    19380
        Reverse Arrhenius coefficients:          7.52E+12  -0.5     4329
5907. c2h5coch3+ch3o2=ch3chcoch3+ch3o2h          2.00E+12   0.0    15250
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.64E+14  -0.7     9612
5908. c2h5coch3+ch3o2=c2h5coch2+ch3o2h           3.01E+12   0.0    17580
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.84E+15  -1.2     9572
5909. c2h5coch3+c2h3=acetoch2+c2h4               5.00E+11   0.0    10400
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.44E+08   0.8    14030
5910. c2h5coch3+c2h3=ch3chcoch3+c2h4             3.00E+11   0.0     3400
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.91E+10   0.6    16440
5911. c2h5coch3+c2h3=c2h5coch2+c2h4              6.15E+10   0.0     4278
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.72E+10   0.1    14950
5912. c2h5coch3+c2h5=acetoch2+c2h6               5.00E+10   0.0    13400
        Reverse Arrhenius coefficients:          9.55E+12  -0.6    13990
5913. c2h5coch3+c2h5=ch3chcoch3+c2h6             3.00E+10   0.0     8600
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.32E+14  -0.8    18600
5914. c2h5coch3+c2h5=c2h5coch2+c2h6              5.00E+10   0.0    11600
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.14E+15  -1.3    19230
5915. c43oo2*o=ch3chcoch3+o2                     1.94E+20  -2.2    26170
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11   0.0        0
5916. c43oo2*o=c4j3ooh2*o                        8.90E+12   0.0    29700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.70E+13  -0.5    16960
5917. c4j3ooh2*o=c2h3cocoh3+ho2                  2.03E+19  -2.4    14130
        Reverse Arrhenius coefficients:          7.00E+10   0.0     7800
5918. ch3chco+oh=c2h5+co2                        1.73E+12   0.0    -1010
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5919. ch3chco+oh=ch3choh+co                      2.00E+12   0.0    -1010
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5920. ch3chco+h=c2h5+co                          4.40E+12   0.0     1459
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5921. ch3chco+o=ch3cho+co                        3.20E+12   0.0     -437
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5922. c2h5coch2=ch2co+c2h5                       1.57E+13   0.0    30000
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.11E+11   0.0     7350
5923. c2h5chco+oh=nc3h7+co2                      3.73E+12   0.0    -1010
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5924. c2h5chco+h=nc3h7+co                        4.40E+12   0.0     1459
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5925. c2h5chco+o=c3h6+co2                        3.20E+12   0.0     -437
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5926. ch3chcho+ho2=c2h5cho+o2                    7.35E+12   0.0     1310
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.81E+16  -0.6    51910
5927. ch3chcho+ho2=ch3chocho+oh                  9.64E+12   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.31E+19  -1.5    28580
5928. ch3chocho=ch3cho+hco                       3.98E+13   0.0     9700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.33E+05   1.7     8282
5929. ch3chcho=c2h3cho+h                         4.16E+12   0.0    34210
```

```
        Reverse Arrhenius coefficients:          6.50E+12   0.0     2900
5930. ch3chcho=ch3chco+h                         1.34E+13  -0.2    33460
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+12   0.0     1200
5931. ch3chcho+h2=c2h5cho+h                      2.16E+05   2.4    18990
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.64E+07   2.1    12110
5932. c2h5cho+ho2=ch3chcho+h2o2                  8.00E+10   0.0    11920
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.22E+10  -0.1     2495
5933. ch3chcho+o2=ch3chco+ho2                    1.81E+11   0.0     1840
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.31E+13  -0.5    19540
5934. ch3chcho+o2=c2h3cho+ho2                    2.72E+11   0.0     7240
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.46E+14  -0.7    25880
5935. ch3chcho+o2=ch3cho+co+oh                   3.62E+10   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5936. sc3h5cho+ho2=sc3h5co+h2o2                  1.00E+12   0.0    11920
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.07E+13  -0.3    17890
5937. sc3h5cho+ch3=sc3h5co+ch4                   3.98E+12   0.0     8700
        Reverse Arrhenius coefficients:          4.31E+13   0.0    31460
5938. sc3h5cho+o=sc3h5co+oh                      7.18E+12   0.0     1389
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.31E+12   0.0    21570
5939. sc3h5cho+o2=sc3h5co+ho2                    4.00E+13   0.0    37600
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.01E+11   0.3     2394
5940. sc3h5cho+h=sc3h5co+h2                      2.60E+12   0.0     2600
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.08E+12   0.0    24880
5941. sc3h5cho+oh=sc3h5co+h2o                    1.07E+13   0.0     -348
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.92E+13   0.0    37080
5942. sc3h5co=c3h5-s+co                          8.60E+15   0.0    23000
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11   0.0     6000
5943. ch3chcoch3=c2h3coch3+h                     3.42E+16  -0.8    41770
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+12   0.0     1200
5944. ch3chcoch3=ch3chco+ch3                     1.41E+15  -0.4    38340
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.23E+11   0.0     7800
5945. c3h6cho-3=c2h5chco+h                       8.43E+15  -0.6    40400
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+12   0.0     1200
5946. c3h6cho-3=c2h3cho+ch3                      3.17E+14  -0.4    29900
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.23E+11   0.0     7800
5947. c3h6cho-2=sc3h5cho+h                       4.95E+12  -0.1    31300
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.00E+12   0.0     2900
5948. c3h6cho-2=c3h6+hco                         8.25E+12  -0.2    21900
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11   0.0     6000
5949. c3h6cho-1=c2h4+ch2cho                      7.40E+11   0.0    21970
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.11E+11   0.0     7350
5950. ic3h6cho=c3h6+hco                          1.03E+15  -0.6    23170
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11   0.0     7800
5951. ic3h6cho=c2h3cho+ch3                       2.42E+13  -0.3    22470
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+11   0.0     7800
5952. ac3h5cho=c3h5-a+hco                        1.81E+19  -1.1    68480
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+13   0.0        0
5953. ac3h5cho+oh=ac3h5co+h2o                    3.37E+12   0.0      616
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.18E+12   0.0    32150
5954. ac3h5cho+oh=c2h3chcho+h2o                  3.12E+06   2.0     -298
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.25E+08   1.8    34930
5955. ac3h5cho+ho2=ac3h5co+h2o2                  3.00E+12   0.0    11920
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.15E+13  -0.3    11990
5956. ac3h5cho+ho2=c2h3chcho+h2o2                9.63E+03   2.6    13910
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.28E+06   2.1    17670
5957. ac3h5cho+ch3o2=ac3h5co+ch3o2h              1.00E+12   0.0    11920
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.58E+13  -0.5    11270
5958. ac3h5cho+ch3o2=c2h3chcho+ch3o2h            1.99E+12   0.0    17050
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.94E+15  -0.7    20090
5959. ac3h5co=c3h5-a+co                          6.20E+15  -1.1     -330
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.50E+11   0.0     4810
5960. c2h3chcho+ho2=c2h3cho+hco+oh               8.91E+12   0.0        0
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5961. hoch2o=ch2o+oh                             8.54E+13  -0.1    17530
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.60E+12   0.0     -614
5962. hoch2o=hocho+h                             1.00E+14   0.0    14900
        Reverse Arrhenius coefficients:          5.92E+11   0.6    12300
5963. hocho+m=co+h2o+m                           2.30E+13   0.0    50000
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.42E+10   0.5    46840
5964. hocho+m=co2+h2+m                           1.50E+16   0.0    57000
        Reverse Arrhenius coefficients:          2.40E+14   0.5    61020
5965. hocho=hco+oh                               4.59E+18  -0.5   108300
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.00E+14   0.0        0
5966. ch2o+ocho=hco+hocho                        5.60E+12   0.0    13600
        Reverse Arrhenius coefficients:          8.58E+11   0.0    26750
5967. ocho+ho2=hocho+o2                          3.50E+10   0.0    -3275
        Reverse Arrhenius coefficients:          3.70E+12  -0.3    52690
5968. ocho+h2o2=hocho+ho2                        2.40E+12   0.0    10000
```

```
        Reverse Arrhenius coefficients:          1.79E+11   0.4    24790
5969. hocho+oh=h2o+co2+h                         2.62E+06   2.1      916
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5970. hocho+oh=h2o+co+oh                         1.85E+07   1.5     -962
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5971. hocho+h=h2+co2+h                           4.24E+06   2.1     4868
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5972. hocho+h=h2+co+oh                           6.03E+13  -0.3     2988
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5973. hocho+ch3=ch4+co+oh                        3.90E-07   5.8     2200
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5974. hocho+ho2=h2o2+co+oh                       1.00E+12   0.0    11920
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5975. hocho+o=co+oh+oh                           1.77E+18  -1.9     2975
        Reverse Arrhenius coefficients:          0.00E+00   0.0        0
5976. h+h+m=h2+m                                 1.00E+18  -1.0        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
5977. h+o2=oh+o                                  1.90E+14   0.0    16812
5978. h+o2+m=ho2+m                               8.00E+17  -0.8        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
5979. h+oh+m=h2o+m                               3.00E+22  -2.0        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
5980. h2+o2=oh+oh                                1.70E+13   0.0    47780
5981. o+h2=oh+h                                  1.30E+04   2.8     5922
5982. h2+oh=h2o+h                                2.16E+08   1.5     3430
5983. o+o+m=o2+m                                 1.14E+17  -1.0        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
5984. o+h+m=oh+m                                 6.20E+16  -0.6        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
5985. h2o+o=oh+oh                                1.50E+10   1.1    17260
5986. oh+oh(+M)=h2o2(+M)                         7.23E+13  -0.4        0
        o2               Enhanced by    4.000E-01
        co               Enhanced by    7.500E-01
        co2              Enhanced by    1.500E+00
        h2o              Enhanced by    6.500E+00
        ch4              Enhanced by    3.000E+00
        c2h6             Enhanced by    3.000E+00
        ar               Enhanced by    3.500E-01
        n2               Enhanced by    4.000E-01
      Low pressure limit: 0.55300E+20 -0.76000E+00  0.00000E+00
      TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+01  0.10000E+09
5987. ho2+oh=h2o+o2                              1.45E+13   0.0     -497
5988. ho2+o=oh+o2                                2.44E+13   0.0     -446
5989. h+ho2=h2+o2                                2.14E+13   0.0     1411
5990. h+ho2=oh+oh                                8.40E+13   0.0      875
5991. h+ho2=h2o+o                                3.01E+13   0.0     1721
5992. ho2+ho2=h2o2+o2                            4.20E+14   0.0    11982
      Declared duplicate reaction...
```

```
5993. ho2+ho2=h2o2+o2                                  1.30E+11    0.0    -1630
      Declared duplicate reaction...
5994. h2o2+oh=ho2+h2o                                  5.80E+14    0.0     9557
5995. h2o2+h=ho2+h2                                    1.70E+12    0.0     3750
5996. h2o2+h=h2o+oh                                    1.00E+13    0.0     3590
5997. h2o2+o=ho2+oh                                    2.80E+13    0.0     6400
5998. h2o2(+M)=>oh+oh(+M)                              3.00E+14    0.0    48500
         o2              Enhanced by    4.000E-01
         co              Enhanced by    7.500E-01
         co2             Enhanced by    1.500E+00
         h2o             Enhanced by    6.500E+00
         ch4             Enhanced by    3.000E+00
         c2h6            Enhanced by    3.000E+00
         ar              Enhanced by    3.500E-01
         n2              Enhanced by    4.000E-01
      Low pressure limit: 0.30000E+18  0.00000E+00  0.45500E+05
      TROE centering:      0.50000E+00  0.10000E+01  0.10000E+09
5999. co+ho2=co2+oh                                    1.15E+05    2.3    17550
6000. co+oh=co2+h                                      4.40E+06    1.5     -740
6001. co+o+m=co2+m                                     2.83E+13    0.0    -4540
         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
6002. co+o2=co2+o                                      2.53E+12    0.0    47700
6003. hco+m=h+co+m                                     2.30E+17   -1.0    17090
         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
6004. hco+oh=co+h2o                                    1.00E+14    0.0        0
6005. hco+o=co+oh                                      3.00E+13    0.0        0
6006. hco+o=co2+h                                      3.00E+13    0.0        0
6007. hco+h=co+h2                                      7.22E+13    0.0        0
6008. hco+o2=co+ho2                                    7.58E+12    0.0      410
6009. hco+ch3=co+ch4                                   1.20E+14    0.0        0
6010. hco+ho2=co2+oh+h                                 3.00E+13    0.0        0
6011. hco+hco=ch2o+co                                  1.20E+13    0.0        0
6012. hco+hco=h2+co+co                                 3.00E+12    0.0        0
6013. hco+c2h6=ch2o+c2h5                               4.70E+04    2.7    18235
6014. ch3+ho2=ch4+o2                                   1.00E+12    0.0        0
6015. ch4(+m)=ch3+h(+m)                                2.40E+16    0.0   104913
      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+0
6016. ch4+oh=ch3+h2o                                   1.60E+06    2.1     2462
6017. ch4+o=ch3+oh                                     1.62E+06    2.3     7094
6018. ch4+h=ch3+h2                                     2.25E+04    3.0     8756
6019. ch4+ch2=ch3+ch3                                  4.30E+12    0.0    10038
6020. ch3+m=ch2+h+m                                    1.90E+16    0.0    91600
         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
6021. ch3+m=ch+h2+m                                    6.90E+14    0.0    82460
         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
6022. ch3+ho2=ch3o+oh                                  5.00E+11    0.3     -687
6023. ch3+h2o2=ch4+ho2                                 6.10E+09    0.0     -596
6024. ch3+o=h+ch2o                                     8.43E+13    0.0        0
6025. ch3+o=>h+h2+co                                   3.37E+13    0.0        0
6026. ch3+o2=ch2o+oh                                   6.62E+11    0.0    14188
6027. ch3+o2=ch3o+o                                    6.60E+13    0.0    31398
6028. ch3+ch3=c2h5+h                                   3.01E+13    0.0    13513
6029. ch3+ch3(+m)=c2h6(+m)                             9.21E+16   -1.2      635
```

```
      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+1
6030. ch3+ch3o=ch4+ch2o                                2.41E+13    0.0        0
6031. ch3+ch2oh=ch4+ch2o                               2.41E+12    0.0        0
6032. ch3+o2(+m)=ch3o2(+m)                             7.80E+08    1.2        0
      Low pressure limit: 0.58000E+26 -0.33000E+01  0.00000E+00
      TROE centering:      0.66400E+00  0.10000E+06  0.10000E+02
6033. ch3+h=ch2+h2                                     7.00E+13    0.0    15100
6034. ch3+oh=ch2+h2o                                   3.00E+06    2.0     2500
6035. ch2+oh=ch+h2o                                    1.13E+07    2.0     3000
6036. ch2+oh=ch2o+h                                    2.50E+13    0.0        0
6037. ch2+o=co+h+h                                     5.00E+13    0.0        0
6038. ch2+o=co+h2                                      6.00E+13    0.0        0
6039. ch2+h=ch+h2                                      3.50E+14    0.0        0
6040. ch2+o2=hco+oh                                    4.30E+10    0.0     -500
6041. ch2+o2=co2+h2                                    3.45E+11    0.0     1000
6042. ch2+o2=co2+h+h                                   1.60E+12    0.0     1000
6043. ch2+o2=co+h2o                                    1.87E+10    0.0    -1000
6044. ch2+o2=co+oh+h                                   8.64E+10    0.0     -500
6045. ch2+o2=ch2o+o                                    5.00E+13    0.0     9000
6046. ch2+co2=ch2o+co                                  1.10E+11    0.0     1000
6047. ch2+ch2=c2h2+h2                                  3.20E+13    0.0        0
6048. ch2+ch2=c2h2+h+h                                 4.00E+13    0.0        0
6049. ch2+ch3=c2h4+h                                   4.00E+13    0.0        0
6050. ch2+ch=c2h2+h                                    4.00E+13    0.0        0
6051. ch2+c2h2=h+c3h3                                  1.20E+13    0.0     6620
6052. ch2+c2h4=c3h6                                    4.30E+12    0.0    10038
6053. ch2+c2h6=ch3+c2h5                                6.50E+12    0.0     7911
6054. ch2(s)+m=ch2+m                                   1.00E+13    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
6055. ch2(s)+o2=co+oh+h                                3.00E+13    0.0        0
6056. ch2(s)+h2=ch3+h                                  7.00E+13    0.0        0
6057. ch2(s)+h=ch2+h                                   2.00E+14    0.0        0
6058. ch2(s)+h=ch+h2                                   3.00E+13    0.0        0
6059. ch2(s)+o=co+h+h                                  1.50E+13    0.0        0
6060. ch2(s)+o=co+h2                                   1.50E+13    0.0        0
6061. ch2(s)+oh=ch2o+h                                 3.00E+13    0.0        0
6062. ch2(s)+ho2=ch2o+oh                               3.00E+13    0.0        0
6063. ch2(s)+h2o2=ch3o+oh                              3.00E+13    0.0        0
6064. ch2(s)+h2o(+m)=ch3oh(+m)                         4.82E+17   -1.2     1145
      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+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
6065. ch2(s)+ch2o=ch3+hco                              1.20E+12    0.0        0
6066. ch2(s)+hco=ch3+co                                1.80E+13    0.0        0
6067. ch2(s)+ch3=c2h4+h                                1.80E+13    0.0        0
6068. ch2(s)+ch4=ch3+ch3                               4.00E+13    0.0        0
6069. ch2(s)+c2h6=ch3+c2h5                             1.20E+14    0.0        0
6070. ch2(s)+c2h4=c3h5-a+h                             1.30E+14    0.0        0
6071. ch2(s)+c2h2=c3h3+h                               1.80E+14    0.0        0
6072. ch2(s)+h2o=ch2+h2o                               3.00E+13    0.0        0
6073. ch2(s)+co2=ch2o+co                               3.00E+12    0.0        0
6074. ch2(s)+ch2co=c2h4+co                             1.60E+14    0.0        0
6075. ch+oh=hco+h                                      3.00E+13    0.0        0
6076. ch+o=co+h                                        1.80E+14    0.0        0
6077. ch+o=C+oh                                        1.80E+14    0.0        0
6078. ch+o2=hco+o                                      1.00E+13    0.0        0
6079. ch+o2=co+oh                                      1.00E+13    0.0        0
6080. ch+co2=hco+co                                    3.40E+12    0.0      690
6081. ch+h2o=ch2o+h                                    1.71E+13    0.0     -755
6082. ch+ch4=c2h4+h                                    6.00E+13    0.0        0
6083. ch+ch3=c2h3+h                                    3.00E+13    0.0        0
6084. ch3+oh(+m)=ch3oh(+m)                             5.65E+13    0.1        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+0
         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
6085. ch3oh(+m)=ch2oh+h(+m)                            2.69E+16   -0.1    98940
      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-0
6086. ch3oh+o2=ch2oh+ho2                               2.05E+13    0.0    44910
6087. ch3oh+o2=ch3o+ho2                                2.50E+12    0.0    55000
6088. ch3oh+ho2=ch2oh+h2o2                             4.82E+10    0.0    12580
6089. ch3oh+oh=ch2oh+h2o                               7.10E+06    1.8     -596
6090. ch3oh+oh=ch3o+h2o                                1.00E+06    2.1      496
6091. ch3oh+o=ch2oh+oh                                 1.63E+13    0.0     5030
6092. ch3oh+h=ch2oh+h2                                 3.20E+13    0.0     6095
6093. ch3oh+h=h2+ch3o                                  8.00E+12    0.0     6095
6094. ch3oh+ch2o=ch3o+ch3o                             1.55E+12    0.0    79570
6095. ch3oh+ch3=ch2oh+ch4                              3.57E+11    0.0     8663
6096. ch3oh+ch3=ch3o+ch4                               4.68E+05    2.3    12764
6097. ch2oh+m=ch2o+h+m                                 1.00E+14    0.0    25100
         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
6098. ch2oh+h=ch2o+h2                                  3.00E+13    0.0        0
6099. ch2oh+o2=ch2o+ho2                                2.17E+14    0.0     4690
6100. ch2oh+o=ch2o+oh                                  4.20E+13    0.0        0
6101. ch2oh+ho2=ch2o+h2o2                              1.20E+13    0.0        0
6102. ch2oh+hco=ch3oh+co                               1.00E+13    0.0        0
6103. ch3o+m=ch2o+h+m                                  4.88E+15    0.0    22773
         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
6104. ch3o+ho2=ch2o+h2o2                               3.00E+11    0.0        0
6105. ch3o+oh=ch2o+h2o                                 1.00E+13    0.0        0
6106. ch3o+o=ch2o+oh                                   1.30E+13    0.0        0
6107. ch3o+h=ch2o+h2                                   2.00E+13    0.0        0
6108. ch3o+o2=ch2o+ho2                                 2.35E+10    0.0     1788
6109. ch3o+ch2o=ch3oh+hco                              1.15E+11    0.0     1280
6110. ch3o+co=ch3+co2                                  1.57E+13    0.0    11804
6111. ch3o+hco=ch3oh+co                                9.00E+13    0.0        0
6112. ch3o+c2h5=ch2o+c2h6                              2.41E+13    0.0        0
6113. ch3o+c2h3=ch2o+c2h4                              2.41E+13    0.0        0
6114. ch3o+c2h4=ch2o+c2h5                              1.20E+11    0.0     7000
6115. ch3o2+ho2=ch3o2h+o2                              2.90E+11    0.0     1552
6116. ch3o2h+oh=ch3o2+h2o                              1.15E+12    0.0     -380
6117. ch3o2h+o=oh+ch3o2                                2.00E+13    0.0     4750
6118. ch3o2h+h=ch3o2+h2                                8.80E+10    0.0     1860
6119. ch3o2h+h=ch3o+h2o                                8.20E+10    0.0     1860
6120. ch2o+ch3o2=hco+ch3o2h                            2.00E+12    0.0    11700
6121. ch3o2+ch4=ch3+ch3o2h                             1.80E+11    0.0    18500
6122. ch3o2+ch3oh=ch2oh+ch3o2h                         1.80E+12    0.0    13712
6123. ch3o2+ho2=ch2o+h2o+o2                            1.80E+10    0.0    -1431
6124. ch3o2+ch3o2=ch2o+ch3oh+o2                        1.05E+09    0.0    -3589
6125. ch3o2+ch3o2=ch3o+ch3o+o2                         7.74E+10    0.0      -61
6126. ch3o2+c2h6=ch3o2h+c2h5                           2.95E+11    0.0    15000
6127. ch3o2+ch3=ch3o+ch3o                              1.00E+12    0.0    -1411
6128. ch3o2+oh=ch3oh+o2                                6.00E+13    0.0        0
6129. ch3o2+h=ch3o+oh                                  9.60E+13    0.0        0
6130. ch3o2+h2o2=ch3o2h+ho2                            2.41E+12    0.0     9936
6131. ch3o2+o=ch3o+o2                                  3.60E+13    0.0        0
6132. ch3o2+ch3o=ch3o2h+ch2o                           3.00E+11    0.0        0
6133. ch3o2+ch2oh=ch2o+ch3o2h                          1.20E+13    0.0        0
6134. ch3o2+c2h5o2=o2+ch3o+ch3ch2o                     7.74E+10    0.0      -61
6135. ch3o2h(+m)=ch3o+oh(+m)                           4.05E+19   -1.2    44255
      Low pressure limit: 0.38910E+43 -0.75020E+01  0.46761E+05
      TROE centering:      0.83750E+00  0.36562E+05  0.49880E+03  0.99900E+0
6136. ch2o+oh=hco+h2o                                  1.72E+09    1.2     -447
6137. ch2o+ch3=hco+ch4                                 7.80E-08    6.1     1970
6138. ch2o+m=hco+h+m                                   5.85E+14    0.0    64200
         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
6139. ch2o+ho2=hco+h2o2                                2.20E+06    2.0    12000
6140. ch2o+o=hco+oh                                    1.81E+13    0.0     3088
6141. ch2o+h=hco+h2                                    1.10E+08    1.8     3000
6142. ch2o+o2=hco+ho2                                  1.23E+06    3.0    52000
6143. c2h6+ho2=c2h5+h2o2                               8.00E+11    0.0    17600
6144. c2h6+oh=c2h5+h2o                                 5.11E+06    2.1      854
6145. c2h6+o=c2h5+oh                                   9.99E+08    1.5     5803
6146. c2h6+h=c2h5+h2                                   5.25E+14    0.0    12800
6147. c2h6+o2=c2h5+ho2                                 1.00E+13    0.0    51000
6148. c2h6+ch3o=c2h5+ch3oh                             3.02E+11    0.0     7000
6149. c2h6+ch3=c2h5+ch4                                7.54E+00    3.7     9883
6150. c2h5o2=c2h5+o2                                   4.93E+50  -11.5    42250
         Reverse Arrhenius coefficients:               1.09E+48  -11.5    10220
6151. c2h5+o2=ch3ch2o+o                                1.10E+13   -0.2    27937
6152. c2h5+ho2=ch3ch2o+oh                              1.90E+12    0.0    -1200
6153. ch3o2+c2h5=ch3o+ch3ch2o                          7.00E+12    0.0    -1000
         Reverse Arrhenius coefficients:               6.57E+16   -0.9    31260
6154. c2h5+ho2=c2h4+h2o2                               1.79E+12    0.0        0
6155. c2h5+oh=c2h4+h2o                                 2.41E+13    0.0        0
6156. c2h5+oh=>ch3+ch2o+h                              2.41E+13    0.0        0
6157. c2h5+o=ch2o+ch3                                  4.24E+13    0.0        0
6158. c2h5+o=ch3cho+h                                  5.30E+13    0.0        0
6159. c2h5+o=c2h4+oh                                   3.05E+13    0.0        0
6160. c2h5+h=c2h4+h2                                   1.25E+14    0.0     8000
6161. c2h5+ch3=c2h4+ch4                                1.14E+12    0.0        0
6162. c2h5+c2h5=c2h4+c2h6                              1.40E+12    0.0        0
6163. c2h4+h(+M)=c2h5(+M)                              3.97E+09    1.3     1292
      Low pressure limit: 0.27910E+19  0.00000E+00  0.75500E+03
      TROE centering:      0.76000E+00  0.40000E+02  0.10250E+04
6164. c2h4+h2=ch3+ch3                                  3.77E+12    0.8    84710
         Reverse Arrhenius coefficients:               1.00E+14    0.0    32000
6165. c2h4+ho2=c2h4o1,2+oh                             2.23E+12    0.0    17190
         Reverse Arrhenius coefficients:               3.52E+17   -1.2    39670
6166. c2h4+M=c2h2+h2+M                                 3.00E+17    0.0    79350
         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
6167. c2h4+M=c2h3+h+M                                  2.97E+17    0.0    96560
         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
6168. c2h4+ho2=c2h4o2h                                 2.00E+11    0.0     8000
6169. c2h4+oh=c2h3+h2o                                 2.02E+13    0.0     5936
6170. c2h4+o=ch3+hco                                   1.20E+08    1.4      530
6171. c2h4+o=ch2cho+h                                  2.00E+08    1.4      530
6172. c2h4+h=c2h3+h2                                   1.00E+14    0.0    15009
6173. c2h4+o2=c2h3+ho2                                 4.22E+13    0.0    57629
6174. c2h4+c2h4=c2h5+c2h3                              5.00E+14    0.0    64700
6175. c2h4+ch3=c2h3+ch4                                6.63E+00    3.7     9499
6176. c2h4+ho2=c2h3+h2o2                               4.80E+04    2.5    27622
6177. c2h4+oh=pc2h4oh                                  1.29E+12    0.0     -817
6178. c2h3+ho2=>ch3+co+oh                              3.00E+13    0.0        0
6179. c2h3+oh=c2h2+h2o                                 3.00E+13    0.0        0
6180. c2h3+h=c2h2+h2                                   3.00E+13    0.0        0
6181. c2h3+o=ch3+co                                    1.50E+13    0.0        0
6182. c2h3+o=ch2co+h                                   1.50E+13    0.0        0
6183. c2h3+ch=ch2+c2h2                                 5.00E+13    0.0        0
6184. c2h3+ch2=c3h4-a+h                                3.00E+13    0.0        0
6185. c2h3+ch3=c2h2+ch4                                3.91E+11    0.0        0
6186. c2h3+c2h6=c2h4+c2h5                              1.50E+13    0.0    10000
6187. c2h3+c2h=c2h2+c2h2                               9.64E+11    0.0        0
6188. c2h3+c2h2=c4h4+h                                 2.00E+12    0.0     5000
6189. c2h3+hco=c2h4+co                                 9.03E+13    0.0        0
6190. c2h3+ch2o=c2h4+hco                               5.42E+03    2.8     5862
6191. c2h3+c2h3=c2h2+c2h4                              1.08E+13    0.0        0
6192. c2h3+c2h3=c4h6                                   5.00E+13    0.0        0
6193. c2h3+c2h4=c4h6+h                                 5.00E+11    0.0     7310
6194. c2h2+oh(+m)=c2h2oh(+m)                           2.29E+13    0.0     1808
      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+0
6195. c2h2+o2=hcco+oh                                2.00E+08    1.5    30100
6196. c2h2+o2=c2h+ho2                                1.21E+13    0.0    74520
6197. c2h2+ho2=ch2co+oh                              6.09E+09    0.0     7948
6198. c2h2+oh=c2h+h2o                                3.40E+07    2.0    14000
6199. c2h2+oh=ch3+co                                 4.84E-04    4.0    -2000
6200. c2h2+oh=ch2co+h                                2.19E-04    4.5    -1000
6201. c2h2+oh=hccoh+h                                5.06E+05    2.3    13500
6202. c2h2+o=ch2+co                                  1.98E+04    2.6      656
6203. c2h2+o=hcco+h                                  4.62E+04    2.6      656
6204. c2h2+ch3=c2h+ch4                               1.80E+11    0.0    17290
6205. c2h2+h(+m)=c2h3(+m)                            2.34E+15   -0.9     3064
      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
6206. c2h+h2=c2h2+h                                  1.51E+13    0.0     3100
6207. c2h+oh=hcco+h                                  2.00E+13    0.0        0
6208. c2h+o=co+ch                                    1.00E+13    0.0        0
6209. c2h+o2=co+hco                                  2.41E+12    0.0        0
6210. c2h4o1,2=ch4+co                                1.21E+13    0.0    57200
6211. c2h4o1,2=ch3cho                                6.00E+13    0.0    57200
6212. c2h4o1,2=ch3+hco                               4.90E+13    0.0    57200
6213. c2h4o1,2+o2=c2h3o+ho2                          4.00E+13    0.0    61500
6214. c2h4o1,2+h=c2h3o+h2                            2.00E+13    0.0     8300
6215. c2h4o1,2+h=c2h3+h2o                            5.00E+09    0.0     5000
6216. c2h4o1,2+h=c2h4+oh                             9.51E+10    0.0     5000
6217. c2h4o1,2+o=c2h3o+oh                            1.91E+12    0.0     5250
6218. c2h4o1,2+oh=c2h3o+h2o                          4.79E+13    0.0     5955
6219. c2h4o1,2+ho2=c2h3o+h2o2                        4.00E+12    0.0    17000
6220. c2h4o1,2+ch3=ch4+c2h3o                         1.07E+12    0.0    11830
6221. c2h4o2h=c2h4o1,2+oh                            3.16E+11    0.0    19500
6222. ch3ch2o+h=ch3cho+h2                            1.00E+13    0.0        0
6223. ch3ch2o+ho2=ch3cho+h2o2                        3.00E+11    0.0        0
6224. c2h5o2+ch3=ch3ch2o+ch3o                        8.17E+12    0.0     -906
6225. c2h5o2=c2h4+ho2                                3.57E+04    2.3    27955
6226. c2h5o2+ho2=c2h5o2h+o2                          3.40E+11    0.0    -1300
6227. c2h5o2+ch2o=c2h5o2h+hco                        1.99E+12    0.0    11660
6228. c2h4+c2h5o2=c2h3+c2h5o2h                       2.23E+12    0.0    17190
6229. ch4+c2h5o2=ch3+c2h5o2h                         1.81E+11    0.0    18480
6230. ch3oh+c2h5o2=ch2oh+c2h5o2h                     1.81E+12    0.0    13710
6231. c2h6+c2h5o2=c2h5+c2h5o2h                       1.32E+13    0.0    20470
6232. c2h4o1,2+c2h5o2=c2h3o+c2h5o2h                  1.13E+13    0.0    30430
6233. c3h6+c2h5o2=c3h5-a+c2h5o2h                     3.24E+11    0.0    14900
6234. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+nc3h7                      1.70E+13    0.0    20460
6235. c2h5o2+c3h8=c2h5o2h+ic3h7                      2.00E+12    0.0    17000
6236. c4h8-1+c2h5o2=c4h7-3+c2h5o2h                   1.40E+12    0.0    14900
6237. c2h5o2+c2h5o2=ch3ch2o+ch3ch2o+o2               1.40E+16   -1.6     1860
6238. c2h5o2h=ch3ch2o+oh                             4.00E+15    0.0    42900
6239. c2h5o2h+o=oh+c2h5o2                            2.00E+13    0.0     4750
6240. c2h5o2h+oh=c2h5o2+h2o                          2.00E+12    0.0     -370
6241. c2h5o2h+h=ch3cho+oh+h2                         3.20E+13    0.0     7700
6242. c2h5o2h+ch3=ch3cho+oh+ch4                      5.70E+11    0.0     8700
6243. c2h5o2h+c2h5=ch3cho+oh+c2h6                    3.40E+11    0.0    11400
6244. c2h5o2h+oh=ch3cho+oh+h2o                       5.90E+12    0.0      900
6245. c2h5o2h+hco=ch3cho+oh+ch2o                     1.80E+12    0.0    16700
6246. c2h5o2h+ch3o=ch3cho+oh+ch3oh                   6.30E+11    0.0     5500
6247. c2h5o2h+ho2=ch3cho+oh+h2o2                     8.00E+11    0.0    16200
6248. ch2cho+o2=ch2co+ho2                            1.58E+10    0.0        0
6249. ch2cho+o2=ch2o+co+oh                           2.51E+10    0.0        0
6250. ch2cho+o2=oh+chocho                            2.51E+11    0.0    14640
6251. ch2cho+o=ch2o+hco                              3.98E+13    0.0        0
6252. ch2cho+ho2=ch2o+hco+oh                         1.00E+13    0.0        0
6253. ch2cho+oh=ch2co+h2o                            2.00E+13    0.0        0
6254. h+ch2co(+m)=ch2cho(+m)                         4.86E+11    0.4    -1755
      Low pressure limit: 0.10120E+43 -0.76300E+01  0.38540E+04
      TROE centering:      0.46500E+00  0.20100E+03  0.11730E+04  0.53330E+0
         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
6255. ch2co+m=ch2+co+m                               3.60E+15    0.0    59270
```

```
         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
6256. ch2co+o2=ch2o+co2                              2.00E+13    0.0    61500
6257. ch2co+ho2=>ch2o+co+oh                          6.00E+11    0.0    12738
6258. ch2co+o=ch2+co2                                1.76E+12    0.0     1349
6259. ch2co+o=hcco+oh                                1.00E+13    0.0     8000
6260. ch2co+oh=ch2oh+co                              6.93E+12    0.0        0
6261. ch2co+oh=hco+ch2o                              2.04E+11    0.0        0
6262. ch2co+oh=hcco+h2o                              1.02E+11    0.0        0
6263. ch2co+oh=ch3+co2                               3.10E+12    0.0        0
6264. ch2co+h=ch3+co                                 1.50E+04    2.8      673
6265. ch2co+h=hcco+h2                                1.80E+14    0.0     8600
6266. ch2co+ch3=c2h5+co                              6.00E+10    0.0        0
6267. ch2co+ch3=hcco+ch4                             7.50E+12    0.0    13000
6268. ch2co+ch2=hcco+ch3                             1.00E+12    0.0        0
6269. ch2co+ch2=c2h4+co                              3.60E+13    0.0    11000
6270. chocho(+m)=ch2o+co(+m)                         4.27E+12    0.0    50600
      Low pressure limit: 0.89100E+17  0.00000E+00  0.49200E+05
6271. chocho(+m)=co+co+h2(+m)                        1.07E+14    0.0    55100
      Low pressure limit: 0.25700E+17  0.00000E+00  0.38400E+05
6272. chocho+oh=choco+h2o                            1.00E+13    0.0        0
6273. chocho+o=choco+oh                              7.24E+12    0.0     1970
6274. chocho+h=ch2o+hco                              1.00E+12    0.0        0
6275. chocho+ho2=choco+h2o2                          1.70E+12    0.0    10700
6276. chocho+ch3=choco+ch4                           1.74E+12    0.0     8440
6277. chocho+o2=hco+co+ho2                           6.30E+13    0.0    30000
6278. hco+hco=chocho                                 1.00E+13    0.0        0
6279. choco=hco+co                                   2.00E+07    0.0        0
6280. choco+o2=co+co+ho2                             6.30E+13    0.0    30000
6281. c2h3o=ch2co+h                                  1.60E+13    0.0    35000
6282. c2h3o=ch3co                                    8.51E+14    0.0    14000
6283. c2h2oh=ch2co+h                                 5.00E+15    0.0    28000
6284. c2h2oh+h=ch2co+h2                              2.00E+13    0.0     4000
6285. c2h2oh+o=ch2co+oh                              2.00E+13    0.0     4000
6286. c2h2oh+oh=ch2co+h2o                            1.00E+13    0.0     2000
6287. c2h2oh+o2=>hco+co2+h2                          4.00E+12    0.0     -250
6288. hccoh+h=ch2co+h                                1.00E+13    0.0        0
6289. hcco+m=ch+co+m                                 6.00E+15    0.0    58821
         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
6290. hcco+oh=hco+co+h                               1.00E+13    0.0        0
6291. hcco+o=co+co+h                                 1.93E+14    0.0      590
6292. hcco+h=ch2(s)+co                               1.50E+14    0.0        0
6293. hcco+o2=co2+co+h                               1.40E+09    1.0        0
6294. hcco+ch2=c2h+ch2o                              1.00E+13    0.0     2000
6295. hcco+ch2=c2h3+co                               3.00E+13    0.0        0
6296. hcco+c2h2=c3h3+co                              1.00E+11    0.0     3000
6297. hcco+ch=c2h2+co                                5.00E+13    0.0        0
6298. hcco+hcco=ch2+co+co                            1.00E+13    0.0        0
6299. ch3cho=ch3+hco                                 2.45E+16    0.0    84128
6300. ch3cho+ho2=ch3co+h2o2                          1.70E+12    0.0    10700
6301. ch3cho+oh=ch3co+h2o                            2.35E+10    0.7    -1113
6302. ch3cho+o=ch3co+oh                              5.85E+12    0.0     1808
6303. ch3cho+h=ch3co+h2                              4.10E+09    1.2     2405
6304. ch3cho+o2=ch3co+ho2                            3.00E+13    0.0    39150
6305. ch3cho+ch3=ch3co+ch4                           1.70E+12    0.0     8440
6306. ch3cho+hco=ch3co+ch2o                          7.80E+13    0.0     8440
6307. ch3cho+o2=ch2cho+ho2                           1.00E+13    0.5    46000
6308. ch3co+m=ch3+co+m                               8.64E+15    0.0    14400
         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
6309. ch3co+o2=ch3co3                                1.20E+11    0.0    -1100
6310. ch3co3+ho2=ch3co3h+o2                          1.75E+10    0.0    -3275
```

```
6311. ch3co3h=ch3co2+oh                              5.01E+14    0.0    40150
6312. ch3co2+m=ch3+co2+m                             4.40E+15    0.0    10500
6313. c2o+o2=co+co+o                                 2.00E+13    0.0        0
6314. c2o+oh=co+co+h                                 2.00E+13    0.0        0
6315. c2o+o=co+co                                    5.00E+13    0.0        0
6316. c2o+h=ch+co                                    5.00E+13    0.0        0
6317. c2+o2=co+co                                    5.00E+13    0.0        0
6318. c2+oh=c2o+h                                    5.00E+13    0.0        0
6319. c2+h2=c2h+h                                    4.00E+05    2.4     1000
6320. h+c2h5(+m)=c2h6(+m)                            5.21E+17   -1.0     1580
      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+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
6321. h+c2h(+m)=c2h2(+m)                             1.00E+17   -1.0        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+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
6322. ch2+c3h8=ch3+ic3h7                             2.19E+12    0.0     6405
6323. ch2+c3h8=ch3+nc3h7                             1.79E+12    0.0     6405
6324. ch3+c2h5(+m)=c3h8(+m)                          4.90E+14   -0.5        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+0
6325. c3h8+o2=nc3h7+ho2                              4.00E+13    0.0    50872
6326. c3h8+o2=ic3h7+ho2                              4.00E+13    0.0    47500
6327. c3h8+ho2=nc3h7+h2o2                            4.76E+04    2.5    16494
6328. c3h8+ho2=ic3h7+h2o2                            9.64E+03    2.6    13910
6329. c3h8+oh=nc3h7+h2o                              3.16E+07    1.8      934
6330. c3h8+oh=ic3h7+h2o                              7.08E+06    1.9     -159
6331. c3h8+o=nc3h7+oh                                3.71E+06    2.4     5505
6332. c3h8+o=ic3h7+oh                                5.49E+05    2.5     3140
6333. c3h8+h=nc3h7+h2                                1.34E+06    2.5     6756
6334. c3h8+h=ic3h7+h2                                1.01E+04    2.9     2931
6335. c3h8+ch3=nc3h7+ch4                             3.00E+12    0.0    11710
6336. c3h8+ch3=ic3h7+ch4                             8.07E+11    0.0    10110
6337. c3h8+c2h5=nc3h7+c2h6                           3.16E+11    0.0    12300
6338. c3h8+c2h5=ic3h7+c2h6                           5.01E+10    0.0    10400
6339. c3h8+c2h3=nc3h7+c2h4                           6.00E+02    3.3    10502
6340. c3h8+c2h3=ic3h7+c2h4                           1.00E+03    3.1     8829
6341. c3h8+ic3h7=nc3h7+c3h8                          1.00E+11    0.0    12900
6342. c3h8+c3h5-a=nc3h7+c3h6                         7.94E+11    0.0    20500
6343. c3h8+c3h5-a=ic3h7+c3h6                         7.94E+11    0.0    16200
6344. c3h8+ch3o=nc3h7+ch3oh                          3.18E+11    0.0     7050
6345. c3h8+ch3o=ic3h7+ch3oh                          7.20E+10    0.0     4470
6346. ic3h7=c2h4+ch3                                 1.14E+11    0.0    31110
6347. c3h6+h(+m)=nc3h7(+m)                           1.33E+13    0.0     3260
      Low pressure limit: 0.62600E+39 -0.66600E+01  0.70000E+04
      TROE centering:      0.10000E+01  0.10000E+04  0.13100E+04  0.48097E+0
         h2o              Enhanced by    6.000E+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
6348. c3h6+h(+m)=ic3h7(+m)                           5.70E+09    1.2      874
      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+0
         h2o              Enhanced by    1.625E+01
         co               Enhanced by    1.875E+00
         co2              Enhanced by    3.850E+00
6349. nc3h7+o2=c3h6+ho2                              3.00E+11    0.0     3000
6350. ic3h7+o2=c3h6+ho2                              2.75E+10    0.0    -2151
6351. ho2+ic3h7=nc3h7o2h                             4.80E+12    0.0        0
6352. nc3h7o2=nc3h7+o2                               3.87E+18   -1.2    36080
         Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0
6353. ic3h7o2=ic3h7+o2                               4.21E+16   -0.3    35910
         Reverse Arrhenius coefficients:             7.54E+12    0.0        0
6354. nc3h7+h=c2h5+ch3                               1.00E+14    0.0        0
6355. ic3h7+h=c2h5+ch3                               5.00E+13    0.0        0
6356. ic3h7+h=c3h6+h2                                3.61E+12    0.0        0
6357. ic3h7+o=ch3coch3+h                             4.82E+13    0.0        0
6358. ic3h7+o=ch3cho+ch3                             4.82E+13    0.0        0
```

```
6359. ch3o2+nc3h7=ch3o+nc3h7o                        1.90E+12    0.0    -1200
6360. ic3h7o2+nc3h7=ic3h7o+nc3h7o                    1.90E+12    0.0    -1200
6361. nc3h7o2+nc3h7=nc3h7o+nc3h7o                    1.90E+12    0.0    -1200
6362. nc3h7+ho2=nc3h7o+oh                            1.90E+12    0.0    -1200
6363. ch3o2+ic3h7=ch3o+ic3h7o                        1.90E+12    0.0    -1200
6364. ic3h7o2+ic3h7=ic3h7o+ic3h7o                    1.90E+12    0.0    -1200
6365. nc3h7o2+ic3h7=nc3h7o+ic3h7o                    1.90E+12    0.0    -1200
6366. ic3h7+ho2=ic3h7o+oh                            1.90E+12    0.0    -1200
6367. nc3h7o=c2h5cho+h                               2.51E+14    0.0    23400
6368. nc3h7o=c2h5+ch2o                               1.00E+15    0.0    21600
6369. ic3h7o=ch3coch3+h                              2.00E+14    0.0    21500
6370. ic3h7o=ch3+ch3cho                              3.98E+14    0.0    17200
6371. ic3h7o+o2=ch3coch3+ho2                         9.09E+09    0.0      390
6372. ic3h7o2+c2h3cho=c2h3co+ic3h7o2h                2.80E+12    0.0    13600
6373. ic3h7o2+c2h4=c2h3+ic3h7o2h                     1.13E+13    0.0    30430
6374. ic3h7o2+c2h5cho=ic3h7o2h+c2h5co                2.00E+11    0.0     9500
6375. ic3h7o2+c2h6=ic3h7o2h+c2h5                     1.70E+13    0.0    20460
6376. ic3h7o2+ch2o=ic3h7o2h+hco                      5.60E+12    0.0    13600
6377. ic3h7o2+ch3cho=ic3h7o2h+ch3co                  2.80E+12    0.0    13600
6378. ic3h7o2+ch4=ch3+ic3h7o2h                       1.12E+13    0.0    24640
6379. ic3h7o2+h2=h+ic3h7o2h                          3.01E+13    0.0    26030
6380. ic3h7o2+ch3oh=ch2oh+ic3h7o2h                   6.30E+12    0.0    19360
6381. ic3h7o2+ho2=ic3h7o2h+o2                        2.90E+11    0.0     1550
6382. ic3h7o2+c2h5o2=ic3h7o+ch3ch2o+o2               5.00E+10    0.0        0
6383. ic3h7o2+ic3h7o2=o2+ic3h7o+ic3h7o               5.00E+10    0.0        0
6384. ic3h7o2+nc3h7o2=ic3h7o+nc3h7o+o2               5.00E+10    0.0        0
6385. ic3h7o2+ch3o2=ic3h7o+ch3o+o2                   1.00E+11    0.0        0
6386. ic3h7o2+ho2=ic3h7o+oh+o2                       1.00E+11    0.0        0
6387. ic3h7o2+c2h5=ic3h7o+ch3ch2o                    1.90E+12    0.0    -1200
6388. ic3h7o2+c3h5-a=ic3h7o+c3h5o                    1.90E+12    0.0    -1200
6389. ic3h7o2+ch3=ic3h7o+ch3o                        1.90E+12    0.0    -1200
6390. nc3h7o2+c2h3cho=c2h3co+nc3h7o2h                2.80E+12    0.0    13600
6391. nc3h7o2+c2h4=c2h3+nc3h7o2h                     1.13E+13    0.0    30430
6392. nc3h7o2+c2h5cho=nc3h7o2h+c2h5co                2.00E+11    0.0     9500
6393. nc3h7o2+c2h6=nc3h7o2h+c2h5                     1.70E+13    0.0    20460
6394. nc3h7o2+ch2o=nc3h7o2h+hco                      5.60E+12    0.0    13600
6395. nc3h7o2+ch3cho=nc3h7o2h+ch3co                  2.80E+12    0.0    13600
6396. nc3h7o2+ch4=ch3+nc3h7o2h                       1.12E+13    0.0    24640
6397. nc3h7o2+h2=h+nc3h7o2h                          3.01E+13    0.0    26030
6398. nc3h7o2+ch3oh=ch2oh+nc3h7o2h                   6.30E+12    0.0    19360
6399. nc3h7o2+ho2=nc3h7o2h+o2                        2.90E+11    0.0     1550
6400. nc3h7o2+c2h5o2=nc3h7o+ch3ch2o+o2               5.00E+10    0.0        0
6401. nc3h7o2+nc3h7o2=o2+nc3h7o+nc3h7o               5.00E+10    0.0        0
6402. nc3h7o2+ch3o2=nc3h7o+ch3o+o2                   1.00E+11    0.0        0
6403. nc3h7o2+ho2=nc3h7o+oh+o2                       1.00E+11    0.0        0
6404. nc3h7o2+c2h5=nc3h7o+ch3ch2o                    1.90E+12    0.0    -1200
6405. nc3h7o2+c3h5-a=nc3h7o+c3h5o                    1.90E+12    0.0    -1200
6406. nc3h7o2+ch3=nc3h7o+ch3o                        1.90E+12    0.0    -1200
6407. nc3h7o2=prooh1-2                               9.90E+07    1.0    30500
6408. nc3h7o2=prooh1-3                               2.50E+07    1.0    28000
6409. ic3h7o2=prooh2-1                               6.00E+11    0.0    29400
         Reverse Arrhenius coefficients:             1.70E+12   -0.5    14360
6410. nc3h7o2h=nc3h7o+oh                             8.06E+19   -1.5    47000
6411. ic3h7o2h=ic3h7o+oh                             8.42E+19   -1.4    46080
6412. prooh1-2=c3h6o1-2+oh                           1.25E+15   -1.2    17580
         Reverse Arrhenius coefficients:             4.96E+08    1.0    29090
6413. prooh1-3=c3h6o1-3+oh                           4.31E+15   -1.3    18240
         Reverse Arrhenius coefficients:             1.19E+18   -1.5    33770
6414. prooh2-1=c3h6o1-2+oh                           3.46E+16   -1.6    18870
         Reverse Arrhenius coefficients:             2.79E+17   -1.5    33090
6415. c3h6+ho2=prooh1-2                              1.50E+11    0.0     7800
6416. c3h6+ho2=prooh2-1                              1.50E+11    0.0     7800
6417. prooh1-3=>oh+ch2o+c2h4                         1.16E+17   -1.1    32570
6418. prooh1-2o2=prooh1-2+o2                         2.70E+20   -1.5    37610
         Reverse Arrhenius coefficients:             7.54E+12    0.0        0
6419. prooh1-3o2=prooh1-3+o2                         1.21E+19   -1.3    35910
         Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0
6420. prooh2-1o2=prooh2-1+o2                         8.00E+18   -1.3    35930
         Reverse Arrhenius coefficients:             4.52E+12    0.0        0
6421. prooh1-2o2=c3ket12+oh                          2.00E+11    0.0    26400
         Reverse Arrhenius coefficients:             1.42E+07    0.6    48360
6422. prooh1-3o2=c3ket13+oh                          2.50E+10    0.0    21400
         Reverse Arrhenius coefficients:             4.45E+05    1.0    51030
6423. prooh2-1o2=c3ket21+oh                          1.00E+11    0.0    23850
         Reverse Arrhenius coefficients:             2.14E+05    1.1    49190
6424. c3ket12=ch3cho+hco+oh                          1.00E+16    0.0    43000
6425. c3ket13=ch2o+ch2cho+oh                         1.00E+16    0.0    43000
6426. c3ket21=ch2o+ch3co+oh                          1.00E+16    0.0    43000
```

```
6427. c3h6o1-2+h=>h2+ch2co+ch3                          2.70E+07   2.0    5000
6428. c3h6o1-2+oh=>h2o+ch2co+ch3                        7.80E+06   2.0    -765
6429. c3h6o1-2+ho2=>h2o2+ch2co+ch3                      1.20E+12   0.0   15500
6430. c3h6o1-2+ch3=>ch4+ch2co+ch3                       6.00E+11   0.0    9600
6431. c3h6o1-2+ch3o2=>ch3o2h+ch2co+ch3                  6.00E+11   0.0    9600
6432. c3h6o1-2+c2h5=>c2h6+ch2co+ch3                     6.00E+11   0.0   11000
6433. c3h6o1-2+o=>oh+hco+c2h4                           7.80E+13   0.0    5200
6434. c3h6o1-3+h=>h2+hco+c2h4                           2.70E+07   2.0    5000
6435. c3h6o1-3+oh=>h2o+hco+c2h4                         7.80E+06   2.0    -765
6436. c3h6o1-3+ho2=>h2o2+hco+c2h4                       1.20E+12   0.0   15500
6437. c3h6o1-3+ch3=>ch4+hco+c2h4                        6.00E+11   0.0    9600
6438. c3h6o1-3+ch3o2=>ch3o2h+hco+c2h4                   4.50E+12   0.0   17500
6439. c3h6o1-3+c2h5=>c2h6+hco+c2h4                      6.00E+11   0.0   11000
6440. c3h6o1-3+o=>oh+hco+c2h4                           7.80E+13   0.0    5200
6441. c3h6o1-2=c2h5+hco                                 2.45E+13   0.0   58500
6442. c3h6o1-2=c2h5cho                                  1.82E+14   0.0   58500
6443. c3h6o1-2=ch3+ch3co                                4.54E+13   0.0   59900
6444. c3h6o1-2=ch3+ch2cho                               2.45E+13   0.0   58820
6445. c3h6o1-2=ch3+c2h3o                                8.00E+15   0.0   92010
6446. c3h6o1-3+h=c2h4cho+h2                             2.70E+07   2.0    5000
6447. c3h6o1-3+oh=c2h4cho+h2o                           7.80E+06   2.0    -765
6448. c3h6o1-3+ho2=c2h4cho+h2o2                         1.20E+12   0.0   15500
6449. c3h6o1-3+ch3=c2h4cho+ch4                          6.00E+11   0.0    9600
6450. c3h6o1-3=c2h5cho                                  1.82E+14   0.0   58500
6451. c3h5-a+h(+m)=c3h6(+m)                             3.70E+14   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+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
6452. c3h6=c3h5-s+h                                     7.59E+14   0.0  101300
6453. c3h6=c3h5-t+h                                     1.45E+15   0.0   98060
6454. c3h6=c2h3+ch3                                     1.10E+21  -1.2   97720
6455. c3h6=ch4+c2h2                                     3.50E+12   0.0   70000
6456. c3h6+o2=c3h5-a+ho2                                1.95E+12   0.0   39000
6457. c3h6+o2=c3h5-s+ho2                                1.40E+13   0.0   60200
6458. c3h6+o2=c3h5-t+ho2                                7.00E+12   0.0   60200
6459. c3h6+ho2=c3h6o1-2+oh                              1.02E+12   0.0   14964
6460. c3h6+ho2=c3h5-a+h2o2                              1.50E+11   0.0   14190
6461. c3h6+ho2=c3h5-s+h2o2                              7.50E+09   0.0   12570
6462. c3h6+ho2=c3h5-t+h2o2                              3.00E+09   0.0    9930
6463. c3h6+oh=c3h5-a+h2o                                7.70E+05   2.2     622
6464. c3h6+oh=c3h5-s+h2o                                1.01E+13   0.0    5960
6465. c3h6+oh=c3h5-t+h2o                                1.11E+06   2.0    1450
6466. c3h6+o=c2h5+hco                                   4.69E+07   1.6    -628
6467. c3h6+o=ch3+ch2cho                                 3.90E+07   1.6    -628
6468. c3h6+o=c2h4+ch2o                                  7.02E+07   1.6    -628
6469. c3h6+o=c3h5-a+oh                                  1.75E+11   0.7    5884
6470. c3h6+o=c3h5-s+oh                                  1.20E+11   0.7    8960
6471. c3h6+o=c3h5-t+oh                                  6.00E+10   0.7    7633
6472. c3h6+h=c3h5-a+h2                                  6.46E+12   0.0    4445
6473. c3h6+h=c3h5-s+h2                                  3.46E+14   0.0   17422
6474. c3h6+h=c3h5-t+h2                                  1.67E+14   0.0   14818
6475. c3h6+ch3=c3h5-a+ch4                               1.60E+11   0.0    8800
6476. c3h6+ch3=c3h5-s+ch4                               3.30E+11   0.0   10110
6477. c3h6+ch3=c3h5-t+ch4                               5.00E+10   0.0    8030
6478. c3h6+c2h5=c3h5-a+c2h6                             1.00E+11   0.0    9800
6479. c3h6+c2h3=c4h6+ch3                                7.20E+11   0.0    5008
6480. c3h6+c2h3=c3h5-a+c2h4                             2.21E+00   3.5    4682
6481. c3h6+c2h3=c3h5-t+c2h4                             2.21E+00   3.5    4682
6482. c3h6+c2h3=c3h5-s+c2h4                             2.21E+00   3.5    4682
6483. c3h6+oh=c3h6oh                                    9.93E+11   0.0    -960
6484. c3h6oh+o2=hoc3h6o2                                1.20E+11   0.0   -1100
6485. hoc3h6o2=ch3cho+ch2o+oh                           1.25E+10   0.0   18900
6486. c3h5-a+ho2=c3h5o+oh                               4.50E+12   0.0       0
6487. c3h5-a+h=c3h4-a+h2                                6.03E+12   0.0       0
6488. c3h5-a+ch3=c3h4-a+ch4                             1.00E+11   0.0       0
6489. c3h5-a+ch2=c4h6+h                                 3.00E+13   0.0       0
6490. c3h5-a+c2h5=c3h4-a+c2h6                           4.00E+11   0.0       0
6491. c3h5-a+c2h3=c3h4-a+c2h4                           1.00E+12   0.0       0
6492. c3h5-a+o=c2h3cho+h                                6.03E+13   0.0       0
6493. c3h5-a+hco=c3h6+co                                6.03E+13   0.0       0
6494. c3h5-s=c3h4-p+h                                   5.62E+12   0.0   43500
6495. c3h5-s+o2=ch3cho+hco                              4.33E+12   0.0       0
6496. c3h5-s+ho2=>ch2co+ch3+oh                          4.50E+12   0.0       0
6497. c3h5-s+h=c3h4-a+h2                                3.33E+12   0.0       0
```

```
6498. c3h5-s+h=c3h4-p+h2                                4.00E+13   0.0       0
6499. c3h5-s+o=>ch2co+ch3                               1.81E+14   0.0       0
6500. c3h5-s+ch3=c3h4-a+ch4                             1.00E+11   0.0       0
6501. c3h5-s+c2h5=c3h4-a+c2h6                           1.00E+11   0.0       0
6502. c3h5-s+c2h3=c3h4-a+c2h4                           1.00E+11   0.0       0
6503. c3h5-t=c3h5-a                                     2.50E+12   0.0   47000
6504. c3h5-t+o2=ch3co+ch2o                              5.01E+12   0.0   19000
6505. c3h5-t+o=>ch2co+ch3                               1.81E+14   0.0       0
6506. c3h5-t+h=c3h4-p+h2                                1.00E+13   0.0       0
6507. c3h5-t+ch3=c3h4-a+ch4                             1.00E+11   0.0       0
6508. c3h5-t+c2h5=c3h4-a+c2h6                           1.00E+11   0.0       0
6509. c3h5-t+c2h3=c3h4-a+c2h4                           1.00E+11   0.0       0
6510. c3h4-a+m=c3h3+h+m                                 2.00E+18   0.0   80000
         h2o              Enhanced by    1.625E+01
6511. c3h4-a=c3h4-p                                     1.20E+15   0.0   92400
      Declared duplicate reaction...
6512. c3h4-a+o2=c3h3+ho2                                4.00E+13   0.0   61500
6513. c3h4-a+ho2=>c3h4o2h                               3.00E+11   0.0    8000
6514. c3h4-a+ho2=c3h3+h2o2                              1.80E+13   0.0   19000
6515. c3h4-a+ho2=>ch2co+ch2+oh                          5.00E+11   0.0   19000
6516. c3h4-a+ho2=>c2h3cho+oh                            5.00E+11   0.0   19000
6517. c3h4-a+ho2=>c2h2+ch2o+oh                          5.00E+11   0.0   19000
6518. c3h4-a+oh=c3h3+h2o                                3.62E+12   0.0    4170
6519. c3h4-a+oh=ch2co+ch3                               1.00E+12   0.0    -393
6520. c3h4-a+oh=hco+c2h4                                1.25E+11   0.0    -393
6521. c3h4-a+oh=c2h5+co                                 1.88E+11   0.0    -393
6522. c3h4-a+oh=c2h3cho+h                               3.75E+11   0.0    -393
6523. c3h4-a+o=c2h4+co                                  1.12E-02   4.6   -4243
6524. c3h4-a+o=c2h3+hco                                 5.00E-04   4.6   -4243
6525. c3h4-a+o=ch2co+ch2                                1.00E-03   4.6   -4243
6526. c3h4-a+o=c2h2+ch2o                                2.50E-03   4.6   -4243
6527. c3h4-a+h=c3h5-a                                   1.20E+12   0.0    2700
6528. c3h4-a+h=c3h5-s                                   8.00E+11   0.0    2000
6529. c3h4-a+h=c3h5-t                                   8.50E+12   0.0    2000
6530. c3h4-a+h=c3h3+h2                                  1.00E+14   0.0   15009
6531. c3h4-a+ch3=c3h3+ch4                               1.33E+12   0.0    7700
6532. c3h4-a+c3h5-a=c3h3+c3h6                           9.00E+11   0.0    7700
6533. c3h4o2h=>c3h4-a+ho2                               3.16E+11   0.0   19500
6534. c3h4o2h=>c3h4o+oh                                 3.16E+11   0.0   19500
6535. c3h4o=>c2h3cho                                    2.45E+14   0.0   58485
6536. c3h4o+o2=>c3h3o+ho2                               4.00E+13   0.0   61500
6537. c3h4o+ho2=>ch2co+ch2o+oh                          1.00E+12   0.0    1434O
6538. c3h4o+ho2=>c3h3o+h2o2                             4.00E+12   0.0   17000
6539. c3h4o+oh=>c3h3o+h2o                               4.79E+13   0.0    5955
6540. c3h4o+h=>c3h3o+h2                                 2.00E+13   0.0    8300
6541. c3h3o=>c2h3co                                     8.51E+14   0.0   14000
6542. c3h3o+o2=>hcco+hco+oh                             5.01E+12   0.0   19192
6543. c3h4-p+m=c3h3+h+m                                 3.39E+22  -2.0   92370
         h2o              Enhanced by    1.625E+01
6544. c3h4-p=c2h+ch3                                    4.20E+16   0.0  100000
6545. c3h4-p+o2=c3h3+ho2                                2.50E+12   0.0   51000
6546. c3h4-p+o2=>hcco+oh+ch2                            1.00E+07   1.5   30100
6547. c3h4-p+ho2=>c2h4+co+oh                            6.09E+09   0.0    7948
6548. c3h4-p+ho2=ch3co+ch2o                             3.00E+12   0.0   16000
6549. c3h4-p+ho2=ch3cho+hco                             4.50E+12   0.0   16000
6550. c3h4-p+ho2=c3h3+h2o2                              5.00E+11   0.0   19000
6551. c3h4-p+oh=c3h3+h2o                                6.50E+02   3.0     200
6552. c3h4-p+oh=ch2co+ch3                               2.00E-04   4.5   -1000
6553. c3h4-p+oh=hco+c2h4                                1.00E-04   4.5   -1000
6554. c3h4-p+oh=ch2o+c2h3                               1.00E-04   4.5   -1000
6555. c3h4-p+oh=c2h3cho+h                               1.00E-04   4.5   -1000
6556. c3h4-p+o=ch2co+ch2                                6.40E+12   0.0    2100
6557. c3h4-p+o=c2h3+hco                                 3.20E+12   0.0    2100
6558. c3h4-p+o=hcco+ch3                                 9.18E+12   0.0    2100
6559. c3h4-p+o=ch2o+c2h2                                3.20E+11   0.0    2100
6560. c3h4-p+o=>hcco+ch2+h                              3.20E+11   0.0    2010
6561. c3h4-p+h=c3h5-t                                   1.30E+13   0.0    1999
6562. c3h4-p+h=c3h3+h2                                  2.00E+14   0.0   15000
6563. c3h4-p+ch3=c3h3+ch4                               4.00E+11   0.0    7700
6564. c3h4-p+c2h3=c3h3+c2h4                             1.00E+11   0.0    7700
6565. c3h4-p+c2h=c3h3+c2h2                              4.20E+16   0.0  100000
6566. c3h4-p+oh(+m)=>c3h4oh(+m)                         2.29E+13   0.0    1808
      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+0
6567. c3h4oh=>ch2co+ch3                                 3.00E+15   0.0   28000
6568. c3h4oh=>hco+c2h4                                  5.00E+14   0.0   28000
6569. c3h4oh=>ch2o+c2h3                                 1.00E+15   0.0   28000
6570. c3h4oh=>c2h3cho+h                                 5.00E+14   0.0   28000
```

```
6571. c3h3+o2=ch2co+hco                                 3.01E+10   0.0    2870
6572. c3h3+ho2=c3h2+h2o2                                2.00E+12   0.0       0
6573. c3h3+oh=c3h2+h2o                                  5.00E+12   0.0       0
6574. c3h3+oh=hcco+ch3                                  5.00E+12   0.0       0
6575. c3h3+o=>c2h2+hco                                  1.38E+14   0.0       0
6576. c3h3+o=c2h3+co                                    4.61E+13   0.0       0
6577. c3h3+o=c2h+ch2o                                   4.61E+13   0.0       0
6578. c3h3+o=c2h2+co+h                                  4.61E+13   0.0       0
6579. c3h3+h=c3h2+h2                                    5.00E+13   0.0    3000
6580. c3h3+ch=ic4h3+h                                   7.00E+13   0.0       0
6581. c3h3+ch=nc4h3+h                                   7.00E+13   0.0       0
6582. c3h3+ch2=c4h4+h                                   4.00E+13   0.0       0
6583. c3h3+ch3=c4h6                                     3.33E+12   0.0       0
6584. ch+c2h2=c3h2+h                                    1.00E+14   0.0       0
6585. c3h2+o2=hcco+hco                                  3.00E+10   0.0    2870
6586. c3h2+oh=c2h2+hco                                  5.00E+13   0.0       0
6587. c3h2+ch2=ic4h3+h                                  3.00E+13   0.0       0
6588. c3h5o=c2h3+ch2o                                   3.39E+14   0.0   22658
6589. c3h5o=c2h3cho+h                                   1.10E+13   0.0   18451
6590. c2h5cho+h=h2+c2h5co                               4.00E+13   0.0    4200
6591. c2h5cho+oh=h2o+c2h5co                             4.20E+12   0.0     500
6592. c2h5cho+ho2=h2o2+c2h5co                           2.80E+12   0.0   13600
6593. c2h5cho+ch3=ch4+c2h5co                            2.00E-06   5.6    2500
6594. c2h5cho+c2h5=c2h6+c2h5co                          1.30E+12   0.0    8500
6595. c2h5cho+o2=c2h5co+ho2                             1.00E+13   0.0   40700
6596. c2h5co+M=co+c2h5+M                                8.64E+15   0.0   14400
6597. c2h3cho+h=h2+c2h3co                               4.00E+13   0.0    4200
6598. c2h3cho+oh=h2o+c2h3co                             4.20E+12   0.0     500
6599. c2h3cho+ho2=h2o2+c2h3co                           1.00E+12   0.0   10000
6600. c2h3cho+ch3=ch4+c2h3co                            2.00E-06   5.6    2500
6601. c2h3cho+c2h5=c2h6+c2h3co                          1.30E+12   0.0    8500
6602. c2h3cho=c2h3+hco                                  2.45E+16   0.0   84128
6603. c2h3cho+o=c2h3co+oh                               5.01E+12   0.0    1790
6604. c2h3cho+c2h3=c2h4+c2h3co                          1.74E+12   0.0    8440
6605. c2h3cho+c3h5-a=c3h6+c2h3co                        1.00E+12   0.0    8000
6606. c2h3co+m=>c2h3+co+m                               8.60E+15   0.0   23000
         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
6607. c2h3co+ho2=c2h3+co2+oh                            2.00E+13   0.0       0
6608. ch3coch3+ch3o2=ch3o2h+ch3coch2                    6.00E+11   0.0    9600
6609. ch3coch3+c2h5=c2h6+ch3coch2                       6.00E+11   0.0   11000
6610. ch3coch3=ch3co+ch3                                2.70E+16   0.0   81740
6611. ch3coch3+o2=ch3coch2+ho2                          1.00E+13   0.0   51000
6612. ch3coch3+ho2=ch3coch2+h2o2                        1.21E+12   0.0   17600
6613. ch3coch3+oh=ch3coch2+h2o                          7.22E+06   2.0     864
6614. ch3coch3+o=ch3coch2+oh                            1.00E+13   0.0    5962
6615. ch3coch3+h=ch3coch2+h2                            5.25E+14   0.0   12800
6616. ch3coch3+ch3=ch3coch2+ch4                         3.30E+11   0.0    9530
6617. ch3coch2=ch2co+ch3                                1.00E+15   0.0   31000
6618. c2h4+hco=c2h4cho                                  2.11E+11   0.0    7350
6619. ch3coco+o2=co2+co2+ch3                            3.00E+10   0.0    2870
6620. ch3coco+ho2=oh+co2+ch3co                          2.00E+13   0.0       0
6621. ch3co+hco=ch3cocho                                1.00E+13   0.0       0
6622. ch3cocho+h=ch3coco+h2                             4.00E+13   0.0    4200
6623. ch3cocho+oh=ch3coco+h2o                           2.69E+10   0.8    -340
6624. ch3cocho+o=ch3coco+oh                             5.00E+12   0.0    1790
6625. ch3cocho+ch3=ch3coco+ch4                          1.70E+12   0.0    8440
6626. ch3cocho+ho2=ch3coco+h2o2                         2.80E+12   0.0   13600
6627. ch3co+co=ch3coco                                  1.50E+11   0.0    3000
6628. pc4h9=c2h5+c2h4                                   2.50E+13   0.0   28800
6629. pc4h9=c4h8-1+h                                    1.26E+13   0.0   38600
6630. pc4h9+o2=c4h8-1+ho2                               1.95E+12   0.0    5000
6631. pc4h9+ho2=c4h8-1+h2o2                             2.41E+13   0.0       0
6632. pc4h9+oh=c4h8-1+h2o                               2.40E+13   0.0       0
6633. pc4h9+h=c4h8-1+h2                                 1.25E+13   0.0       0
6634. pc4h9+ch3=c4h8-1+ch4                              2.00E+12   0.0       0
6635. pc4h9+c2h5=c4h8-1+c2h6                            1.60E+12   0.0       0
6636. pc4h9+c3h5-a=c4h8-1+c3h6                          1.00E+12   0.0       0
6637. pc4h9+c4h7-3=c4h8-1+c4h8-1                        1.00E+12   0.0       0
6638. sc4h9=T2c4h8+h                                    4.57E+12   0.0   34000
6639. sc4h9=C2c4h8+h                                    4.17E+12   0.0   34780
6640. sc4h9+o2=c4h8-1+ho2                               7.59E+09   0.0   -2000
6641. sc4h9+o2=T2c4h8+ho2                               9.00E+09   0.0   -2000
6642. sc4h9+o2=C2c4h8+ho2                               9.00E+09   0.0   -2000
6643. sc4h9+ho2=c4h8-1+h2o2                             2.40E+13   0.0       0
```

```
6644. sc4h9+ho2=T2c4h8+h2o2                             2.40E+13   0.0       0
6645. sc4h9+ho2=C2c4h8+h2o2                             2.40E+13   0.0       0
6646. sc4h9+oh=c4h8-1+h2o                               2.40E+13   0.0       0
6647. sc4h9+oh=T2c4h8+h2o                               2.40E+13   0.0       0
6648. sc4h9+oh=C2c4h8+h2o                               2.40E+13   0.0       0
6649. sc4h9+h=c4h8-1+h2                                 3.33E+13   0.0       0
6650. sc4h9+h=T2c4h8+h2                                 5.00E+13   0.0       0
6651. sc4h9+h=C2c4h8+h2                                 5.00E+13   0.0       0
6652. sc4h9+ch3=c4h8-1+ch4                              8.00E+11   0.0       0
6653. sc4h9+ch3=T2c4h8+ch4                              1.00E+12   0.0       0
6654. sc4h9+ch3=C2c4h8+ch4                              1.00E+12   0.0       0
6655. C2c4h8=T2c4h8                                     3.62E+13   0.0   61330
6656. C2c4h8=c4h6+h2                                    1.00E+13   0.0   65500
6657. C2c4h8=c4h7-3+h                                   4.07E+18  -1.0   97350
6658. C2c4h8=c3h5-s+ch3                                 2.00E+16   0.0   71300
6659. C2c4h8+oh=c4h7-3+h2o                              9.00E+06   2.0     -60
6660. C2c4h8+o=ic3h7+hco                                6.03E+12   0.0       0
6661. C2c4h8+o=ch3cho+c2h4                              1.00E+12   0.0       0
6662. C2c4h8+h=c4h7-3+h2                                1.00E+13   0.0    3500
6663. C2c4h8+ch3=c4h7-3+ch4                             1.00E+11   0.0    8200
6664. T2c4h8=c4h7-3+h                                   4.07E+18  -1.0   97350
6665. T2c4h8=c3h5-s+ch3                                 2.00E+16   0.0   71300
6666. T2c4h8+oh=c4h7-3+h2o                              9.00E+06   2.0     -60
6667. T2c4h8+o=ic3h7+hco                                6.03E+12   0.0       0
6668. T2c4h8+o=ch3cho+c2h4                              1.00E+12   0.0       0
6669. T2c4h8+h=c4h7-3+h2                                5.00E+12   0.0    3500
6670. T2c4h8+ch3=c4h7-3+ch4                             1.00E+11   0.0    8200
6671. c4h8-1=c4h7-3+h                                   4.08E+18  -1.0   97350
6672. c3h5-a+ch3=c4h8-1                                 1.02E+14  -0.3    -130
6673. c4h8-1=c2h3+c2h5                                  1.00E+19  -1.0   96770
6674. c4h8-1+o2=c4h7-3+ho2                              4.00E+12   0.0   40000
6675. c4h8-1+ho2=c4h7-3+h2o2                            1.00E+11   0.0   17060
6676. c4h8-1+ho2=c4h7-4+h2o2                            6.00E+11   0.0   17000
6677. c4h8-1+ho2=>ch2o+c3h6+oh                          2.50E+12   0.0   14340
6678. c4h8-1+oh=c4h7-3+h2o                              4.19E+06   2.0    -543
6679. c4h8-1+oh=c4h7-4+h2o                              2.67E+06   2.0     450
6680. c4h8-1+oh=ch2o+nc3h7                              2.00E+12   0.0    -928
6681. c4h8-1+oh=ch3+c2h5cho                             6.80E+11   0.0    -928
6682. c4h8-1+o=c3h6+ch2o                                7.23E+05   2.3   -1050
6683. c4h8-1+o=ch3cho+c2h4                              1.30E+13   0.0     850
6684. c4h8-1+o=c2h5+ch3co                               1.62E+13   0.0     850
6685. c4h8-1+o=c4h7-3+oh                                2.60E+12   0.0    4500
6686. c4h8-1+o=c4h7-4+oh                                5.10E+13   0.0    7850
6687. c4h8-1+h=c4h7-3+h2                                1.95E+13   0.0    4445
6688. c4h8-1+h=c4h7-4+h2                                2.85E+07   2.0    7700
6689. c4h8-1+o=c4h6+ch4                                 3.00E-01   4.0    8200
6690. c4h8-1+ch3=c4h7-3+ch4                             1.00E+11   0.0    7300
6691. c4h8-1+c2h5=c4h7-3+c2h6                           1.00E+11   0.0    8300
6692. c4h8-1+c2h3=c4h7-3+c2h4                           7.20E+11   0.0    5008
6693. c4h8-1+c3h5-a=c4h7-3+c3h6                         8.00E+10   0.0   12400
6694. c4h8-1+c3h5-s=c4h7-3+c3h6                         8.00E+10   0.0   12400
6695. c4h8-1+c3h5-t=c4h7-3+c3h6                         8.00E+10   0.0   12400
6696. c4h7-4=c2h4+c2h3                                  5.00E+13   0.0   38000
6697. c4h7-4=c4h6+h                                     3.16E+13   0.0   34780
6698. c4h7-4+o2=c4h6+ho2                                1.02E+12   0.0   22654
6699. c4h7-4+ho2=c4h6+h2o2                              1.80E+12   0.0       0
6700. c4h7-4+ho2=>c3h5-a+ch2o+oh                        1.00E+12   0.0       0
6701. c4h7-4+oh=c4h6+h2o                                4.00E+13   0.0       0
6702. c4h7-4+o=c4h6+oh                                  4.00E+13   0.0       0
6703. c4h7-4+h=c4h6+h2                                  3.16E+13   0.0       0
6704. c4h7-4+ch3=c4h6+ch4                               7.94E+12   0.0       0
6705. c4h7-4+c2h3=c4h6+c2h4                             4.00E+12   0.0       0
6706. c4h7-4+c2h5=c4h6+c2h6                             4.00E+12   0.0       0
6707. c4h7-4+c2h5=c4h8-1+c2h4                           5.00E+11   0.0       0
6708. c4h7-4+c3h3=c4h6+c3h4-p                           4.00E+12   0.0       0
6709. c4h7-4+c3h3=c4h6+c3h4-a                           4.00E+12   0.0       0
6710. c4h7-4+c3h5-a=c4h6+c3h6                           6.30E+12   0.0       0
6711. c4h7-4+c4h7-4=c4h6+c4h8-1                         3.16E+12   0.0       0
6712. c4h7-4+c2h6=c4h8-1+c2h5                           3.00E+13   0.0   12300
6713. c4h7-4+c2h4=c4h8-1+c2h3                           1.00E+11   0.0   15000
6714. c4h7-4+c3h6=c4h8-1+c3h5-a                         1.00E+11   0.0    9800
6715. c4h7-4+c4h8-1=c4h8-1+c4h7-3                       1.00E+11   0.0    8300
6716. c4h6+c4h7-4=nc4h5+c4h8-1                          6.32E+02   3.1   20010
6717. c4h6+c4h7-4=ic4h5+c4h8-1                          6.32E+02   3.1   18010
6718. c4h7-3=c4h6+h                                     3.00E+13   0.0   51500
6719. c4h7-3+o2=c4h6+ho2                                6.90E+11   0.0   15200
6720. c4h7-3+ho2=c4h6+h2o2                              1.00E+12   0.0       0
6721. c4h7-3+ho2=>c2h3cho+ch3+oh                        7.00E+12   0.0   -1000
```

6722.	c4h7-3+oh=c4h6+h2o	4.00E+13	0.0	0
6723.	c4h7-3+o=c4h6+oh	4.00E+13	0.0	0
6724.	c4h7-3+h=c4h6+h2	3.16E+12	0.0	0
6725.	c4h7-3+ch3=c4h6+ch4	1.00E+13	0.0	0
6726.	c4h7-3+c2h3=c4h6+c2h4	4.00E+12	0.0	0
6727.	c4h7-3+c2h5=c4h6+c2h6	4.00E+12	0.0	0
6728.	c4h7-3+c2h5=c4h8-1+c2h4	5.00E+11	0.0	0
6729.	c4h7-3+c3h3=c4h6+c3h4-p	4.00E+12	0.0	0
6730.	c4h7-3+c3h3=c4h6+c3h4-a	4.00E+12	0.0	0
6731.	c4h7-3+c3h5-a=c4h6+c3h6	6.30E+12	0.0	0
6732.	c4h7-3+c3h5-a=c4h8-1+c3h4-a	1.00E+12	0.0	0
6733.	c4h7-3+c4h7-3=c4h6+c4h8-1	3.00E+12	0.0	0
6734.	c4h7-1=c2h2+c2h5	2.00E+13	0.0	33000
6735.	c4h7-1=c4h7-4	1.50E+08	1.0	29400
6736.	c4h7-1=c4h7-3	1.67E+13	1.0	34500
6737.	c4h7-1+o2=hco+c2h5cho	4.60E+16	-1.4	1010
6738.	c3h3+ch3=butyne	5.00E+12	0.0	0
6739.	butyne+ho2=nc4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000
6740.	butyne+ho2=ic4h5+h2o2	5.00E+11	0.0	17000
6741.	butyne+oh=nc4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200
6742.	butyne+oh=ic4h5+h2o	2.60E+02	3.0	200
6743.	butyne+oh=ch2co+c2h5	4.00E-04	4.5	-1000
6744.	butyne+o=c3h6+co	2.00E+13	0.0	1660
6745.	butyne+h=c3h4-a+ch3	1.30E+05	2.5	1000
6746.	butyne+h=c2h5+c2h2	6.50E+04	2.5	1000
6747.	butyne+h=ic4h5+h2	6.50E+13	0.0	9400
6748.	butyne+h=nc4h5+h2	6.50E+13	0.0	9400
6749.	butyne+ch3=ic4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500
6750.	butyne+ch3=nc4h5+ch4	1.00E+14	0.0	19500
6751.	butyn2=c4h6	3.00E+13	0.0	65000
6752.	butyn2=c4h612	3.00E+13	0.0	67000
6753.	butyn2+h=c3h4-p+ch3	2.60E+05	2.5	1000
6754.	butyne=c4h612	2.50E+13	0.0	65000
6755.	c4h612=c4h6	2.50E+13	0.0	63000
6756.	c4h612=c3h3+ch3	2.00E+15	0.0	75000
6757.	c4h612+h=c3h4-a+ch3	6.00E+12	0.0	2100
6758.	c4h612+h=c3h4-p+ch3	6.00E+12	0.0	2100
6759.	ic3h7+c2h2=c4h6+ch3	2.77E+10	0.0	6504
6760.	c4h6=c2h4+c2h2	1.00E+14	0.0	75000
6761.	c4h6=nc4h5+h	1.58E+16	0.0	110000
6762.	c4h6+o2=nc4h5+ho2	2.80E+13	0.0	62500
6763.	c4h6+o2=ic4h5+ho2	1.40E+12	0.0	50600
6764.	c4h6+ho2=nc4h5+h2o2	2.00E+11	0.0	12600
6765.	c4h6+ho2=ic4h5+h2o2	1.00E+11	0.0	9920
6766.	c4h6+oh=nc4h5+h2o	1.00E+07	2.0	7253
6767.	c4h6+oh=ic4h5+h2o	8.00E+06	2.0	3744
6768.	c4h6+o=ic4h5+oh	4.53E+15	-0.5	7028
6769.	c4h6+o=nc4h5+oh	2.27E+15	-0.5	7028
6770.	c4h6+h=c3h4-p+ch3	1.30E+03	2.5	1000
6771.	c4h6+h=c3h4-a+ch3	1.00E+13	0.0	15000
6772.	c4h6+h=nc4h5+h2	5.00E+15	0.0	22800
6773.	c4h6+h=ic4h5+h2	2.50E+15	0.0	22800
6774.	c4h6+ch3=nc4h5+ch4	2.00E+14	0.0	24800
6775.	c4h6+ch3=ic4h5+ch4	4.00E+14	0.0	22800
6776.	c4h6+c2h3=nc4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	20010
6777.	c4h6+c2h3=ic4h5+c2h4	6.32E+02	3.1	18010
6778.	c4h6+c4h7-3=nc4h5+c4h8-1	6.32E+02	3.1	20010
6779.	c4h6+c4h7-3=ic4h5+c4h8-1	6.32E+02	3.1	18010
6780.	c4h6+oh=hoc4h6	3.50E+12	0.0	-994
6781.	hoc4h6=>oc4h6+h	5.00E+14	0.0	28000
6782.	c4h6+o=>oc4h6	3.00E+13	0.0	80
6783.	oc4h6=>c3h6+co	2.00E+13	0.0	57000
6784.	oc4h6=>c2h4+ch2co	5.00E+14	1.0	78000
6785.	oc4h6+o=>c2h3o+c2h3o	1.20E+08	1.4	530
6786.	oc4h6+oh=>ch2co+c2h3+h2o	2.02E+13	0.0	5955
6787.	oc4h6+ho2=>c2h3o+c2h3o+oh	5.00E+12	0.0	14964
6788.	oc4h6+h=>c4h5o+h2	4.10E+09	1.2	2405
6789.	oc4h6+oh=>c4h5o+h2o	2.35E+10	0.7	-1113
6790.	oc4h6+ho2=>c4h5o+h2o2	1.70E+12	0.0	10700
6791.	oc4h6+o=>c4h5o+oh	5.85E+12	0.0	1808
6792.	oc4h6+ch3=>c4h5o+ch4	1.70E+12	0.0	8440
6793.	oc4h6+c2h3=>c4h5o+c2h4	1.70E+12	0.0	8440
6794.	oc4h6+c3h5-a=>c4h5o+c3h6	1.70E+12	0.0	8440
6795.	c4h6+ho2=>c4h6o2h	2.00E+11	0.0	8000
6796.	c4h6o2h=>c2h3cho+oh+ch2	1.00E+10	0.0	19500
6797.	c4h6o2h=>oc4h6+oh	2.00E+11	0.0	19500
6798.	c4h5o+h=>oc4h6	5.00E+12	0.0	0
6799.	c4h5o+o2=>c2h3cho+co+oh	1.00E+12	0.0	25000

6800.	c4h5o=>ch2co+c2h3	1.00E+15	0.0	65000
6801.	c4h5o=>co+c2h2+ch3	5.00E+14	0.0	65000
6802.	c4h5o=>co+c3h5-a	5.00E+14	0.0	60000
6803.	ic4h5+o2=c2h3co+ch2o	2.00E+11	0.0	14000
6804.	ic4h5+o=>ch2co+c2h3	1.00E+13	0.0	2000
6805.	ic4h5+ho2=ch2co+c2h3+oh	1.00E+12	0.0	2000
6806.	c3h6+ic4h5=c3h5-a+c4h6	1.00E+11	0.0	9800
6807.	ic4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840
6808.	nc4h5=c2h3+c2h2	5.00E+13	0.0	44000
6809.	nc4h5+o2=c2h3cho+hco	2.00E+11	0.0	14000
6810.	nc4h5+o=>c3h5-a+co	1.00E+13	0.0	2000
6811.	nc4h5+oh=c4h4+h2o	2.00E+07	2.0	1000
6812.	nc4h5+ho2=>c3h5-a+co+oh	1.00E+13	0.0	0
6813.	nc4h5+h=c4h4+h2	1.00E+14	0.0	0
6814.	nc4h5+h=ic4h5+h	1.00E+14	0.0	0
6815.	nc4h5+ch2o=c4h6+hco	4.00E+12	0.0	8840
6816.	c3h6+nc4h5=c3h5-a+c4h6	1.00E+11	0.0	9800
6817.	c4h4=c2h2+c2h2	3.20E+13	0.0	77100
6818.	c4h4+M=nc4h3+h+M	1.00E+20	0.0	99300
6819.	c4h4=ic4h3+h	6.30E+13	0.0	87100
6820.	c4h4=c4h2+h2	1.26E+15	0.0	94700
6821.	c4h4+o2=nc4h3+ho2	1.00E+13	0.0	63200
6822.	c4h4+o2=ic4h3+ho2	1.00E+13	0.0	44640
6823.	c4h4+ho2=nc4h3+h2o2	2.00E+11	0.0	12600
6824.	c4h4+ho2=ic4h3+h2o2	1.00E+11	0.0	9920
6825.	c4h4+ho2=c3h3+hco+oh	4.00E+11	0.0	8000
6826.	c4h4+oh=ic4h3+h2o	2.00E+07	2.0	2000
6827.	c4h4+oh=nc4h3+h2o	7.50E+06	2.0	5000
6828.	c4h4+o=c3h4-a+co	3.00E+13	0.0	1810
6829.	c4h4+h=ic4h3+h2	3.33E+05	2.5	9240
6830.	c4h4+h=nc4h3+h2	2.00E+07	2.0	15000
6831.	c4h4+ch3=ic4h3+ch4	1.66E+01	3.7	9499
6832.	c4h4+nc4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000
6833.	c4h4+ic4h5=ic4h3+c4h6	4.00E+11	0.0	5000
6834.	c2h2+c2h2=ic4h3+h	6.31E+13	0.0	41600
6835.	ic4h3+o2=ch2co+hcco	1.00E+12	0.0	0
6836.	ic4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0
6837.	ic4h3+o=h2c4o+h	2.00E+13	0.0	0
6838.	ic4h3+h=c4h2+h2	5.00E+13	0.0	0
6839.	nc4h3+oh=c4h2+h2o	3.00E+13	0.0	0
6840.	nc4h3+h=c4h2+h2	5.00E+13	0.0	0
6841.	nc4h3+h=ic4h3+h	1.00E+14	0.0	0
6842.	h2c4o+oh=ch2co+hcco	1.00E+07	2.0	2000
6843.	h2c4o+h=c2h2+hcco	5.00E+13	0.0	3000
6844.	c4h2+M=c4h+h+M	3.50E+17	0.0	80065
6845.	c4h2+oh=h2c4o+h	6.66E+12	0.0	-410
6846.	c4h2+o=c3h2+co	1.20E+12	0.0	0
6847.	c5h11-1=c5h11-2	9.84E+10	0.0	19660
6848.	c5h11-1=c2h4+nc3h7	4.50E+13	0.0	28700
6849.	c5h11-1=c5h10-1+h	4.26E+13	0.0	38600
6850.	c5h11-1+o2=c5h10-1+ho2	1.50E-19	0.0	2000
6851.	c5h11-1+oh=c5h10-1+h2o	2.43E+13	0.0	0
6852.	c5h11-1+o=ch2o+pc4h9	5.00E+14	0.0	0
6853.	c5h11-1+h=c5h10-1+h2	1.25E+13	0.0	0
6854.	c5h11-2=c3h6+c2h5	4.50E+13	0.0	29700
6855.	c5h11-2=c5h10-1+h	6.30E+12	0.0	40400
6856.	c5h11-2=c2c5h10+h	5.00E+12	0.0	37900
6857.	c5h11-2=t2c5h10+h	5.00E+12	0.0	37900
6858.	c5h11-2+o2=c5h10-1+ho2	2.00E+11	0.0	5020
6859.	c5h11-2+o2=t2c5h10+ho2	2.00E+11	0.0	5020
6860.	c5h11-2+o2=c2c5h10+ho2	1.00E+11	0.0	5020
6861.	c5h11-2+ho2=c2c5h10+h2o2	2.40E+13	0.0	0
6862.	c5h11-2+ho2=t2c5h10+h2o2	2.40E+13	0.0	0
6863.	c5h11-2+ho2=>nc3h7+ch3cho+oh	2.43E+13	0.0	0
6864.	c5h11-2+oh=c5h10-1+h2o	2.40E+13	0.0	0
6865.	c5h11-2+oh=c2c5h10+h2o	2.40E+13	0.0	0
6866.	c5h11-2+oh=t2c5h10+h2o	2.40E+13	0.0	0
6867.	c5h11-2+o=nc3h7+ch3cho	5.00E+14	0.0	0
6868.	c5h11-2+h=c2c5h10+h2	5.00E+13	0.0	0
6869.	c5h11-2+h=t2c5h10+h2	5.00E+13	0.0	0
6870.	c5h10-1=c2h5+c3h5-a	1.00E+16	0.0	71340
6871.	c5h10-1=c2h4+c3h6	3.16E+12	0.0	57430
6872.	c2h3+nc3h7=c5h10-1	9.64E+12	0.0	0
6873.	c5h10-1+o2=c5h913+ho2	2.70E+13	0.0	37000
6874.	c5h10-1+oh=c5h913+h2o	2.25E+13	0.0	2217
6875.	c5h10-1+ho2=c5h913+h2o2	1.00E+11	0.0	17060
6876.	c5h10-1+o=c5h913+oh	9.61E+12	0.0	1968
6877.	c5h10-1+h=c5h913+h2	1.95E+13	0.0	4445

6878.	c5h10-1+ch3=c5h913+ch4	1.00E+11	0.0	7300
6879.	c5h10-1+c2h5=c5h913+c2h6	1.00E+11	0.0	7300
6880.	c5h10-1+oh=ch2o+pc4h9	1.37E+12	0.0	-1040
6881.	c5h10-1+oh=ch3+nc3h7cho	1.37E+12	0.0	-1040
6882.	c2c5h10=t2c5h10	1.86E+14	0.0	63501
6883.	c2c5h10=c4h7-3+ch3	1.00E+16	0.0	81000
6884.	c2c5h10+o2=c5h913+ho2	6.00E+13	0.0	40000
6885.	c2c5h10+o2=c5h924+ho2	2.70E+13	0.0	37000
6886.	c2c5h10+ho2=c5h913+h2o2	1.47E+11	0.0	14962
6887.	c2c5h10+ho2=c5h924+h2o2	9.80E+10	0.0	12583
6888.	c2c5h10+ho2=>ch3cho+c3h6+oh	5.01E+11	0.0	12068
6889.	c2c5h10+oh=c5h913+h2o	3.37E+13	0.0	3060
6890.	c2c5h10+oh=c5h924+h2o	2.25E+13	0.0	2217
6891.	c2c5h10+o=c5h913+oh	1.44E+13	0.0	2968
6892.	c2c5h10+o=c5h924+oh	9.61E+12	0.0	1968
6893.	c2c5h10+o=ch3cho+c3h6	1.00E+12	0.0	0
6894.	c2c5h10+h=c5h913+h2	2.92E+13	0.0	5445
6895.	c2c5h10+h=c5h924+h2	1.95E+13	0.0	4445
6896.	c2c5h10+ch3=c5h913+ch4	1.50E+11	0.0	9800
6897.	c2c5h10+ch3=c5h924+ch4	1.00E+11	0.0	8200
6898.	c2c5h10+c2h5=c5h913+c2h6	1.50E+11	0.0	9000
6899.	c2c5h10+c2h5=c5h924+c2h6	1.00E+11	0.0	8000
6900.	t2c5h10=c4h7-3+ch3	1.00E+16	0.0	81000
6901.	t2c5h10+o2=c5h913+ho2	2.70E+13	0.0	37000
6902.	t2c5h10+o2=c5h924+ho2	2.70E+13	0.0	37000
6903.	t2c5h10+ho2=c5h913+h2o2	1.47E+11	0.0	14962
6904.	t2c5h10+ho2=c5h924+h2o2	9.80E+10	0.0	12583
6905.	t2c5h10+ho2=>ch3cho+c3h6+oh	5.01E+11	0.0	12068
6906.	t2c5h10+oh=c5h913+h2o	3.37E+13	0.0	3060
6907.	t2c5h10+oh=c5h924+h2o	2.25E+13	0.0	2217
6908.	t2c5h10+o=c5h913+oh	1.44E+13	0.0	2968
6909.	t2c5h10+o=c5h924+oh	9.61E+12	0.0	1968
6910.	t2c5h10+o=ch3cho+c3h6	1.00E+12	0.0	0
6911.	t2c5h10+h=c5h913+h2	2.92E+13	0.0	5445
6912.	t2c5h10+h=c5h924+h2	1.95E+13	0.0	4445
6913.	t2c5h10+ch3=c5h913+ch4	1.50E+11	0.0	8200
6914.	t2c5h10+ch3=c5h924+ch4	1.00E+11	0.0	7300
6915.	t2c5h10+c2h5=c5h913+c2h6	1.50E+11	0.0	9000
6916.	t2c5h10+c2h5=c5h924+c2h6	1.00E+11	0.0	8000
6917.	c5h913+h=c5h10-1	1.00E+13	0.0	0
6918.	c5h913+h=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0
6919.	c5h913+h=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0
6920.	c5h924+h=c2c5h10	1.00E+13	0.0	0
6921.	c5h924+h=t2c5h10	1.00E+13	0.0	0
6922.	c5h915=c3h5-a+c2h4	1.00E+13	0.0	30000
6923.	c5h913=c4h6+ch3	1.30E+13	0.0	38200
6924.	c5h913=c5h813+h	3.00E+13	0.0	50500
6925.	c5h913+o2=c5h913oo	1.20E+10	0.0	-2300
6926.	c5h913+o2=c5h931oo	1.20E+10	0.0	-2300
6927.	c5h913+ho2=>c2h3cho+c2h5+oh	7.00E+12	0.0	-1000
6928.	c5h913+ho2=>c2h5cho+c2h3+oh	7.00E+12	0.0	-1000
6929.	c5h913+h=c5h813+h2	3.16E+13	0.0	0
6930.	c5h913+ch3=c5h813+ch4	1.00E+13	0.0	0
6931.	c5h913+c2h3=c5h813+c2h4	4.00E+12	0.0	0
6932.	c5h913+c2h5=c5h813+c2h6	4.00E+12	0.0	0
6933.	c5h913+c3h5-a=c5h813+c3h6	4.00E+12	0.0	0
6934.	c5h913+c4h7-3=c5h813+c4h8-1	3.16E+12	0.0	0
6935.	c5h913=c5h924	1.00E+08	1.0	21400
6936.	c5h924=c5h813+h	3.00E+13	0.0	51500
6937.	c5h924+o2=c5h924oo	1.20E+10	0.0	-2300
6938.	c5h924+ho2=>ch3cho+c3h5-s+oh	7.00E+12	0.0	-1000
6939.	c5h924+h=c5h813+h2	3.16E+12	0.0	0
6940.	c5h924+ch3=c5h813+ch4	1.00E+13	0.0	0
6941.	c5h924+c2h3=c5h813+c2h4	4.00E+12	0.0	0
6942.	c5h924+c2h5=c5h813+c2h6	4.00E+12	0.0	0
6943.	c5h924+c3h5-a=c5h813+c3h6	4.00E+12	0.0	0
6944.	c5h924+c4h7-3=c5h813+c4h8-1	3.16E+12	0.0	0
6945.	c5h913oo=c2h5cho+ch2cho	1.70E+09	1.0	13200
6946.	c5h913oo+ho2=c5h913ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
6947.	c5h913oo+ch3o2=>c5h913o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
6948.	c5h913ooh=c5h913o+oh	1.50E+16	0.0	42500
6949.	c2h5+c2h3cho=c5h913o	1.50E+11	0.0	11900
6950.	c2h5cho+c2h3=c5h913o	1.50E+11	0.0	18900
6951.	c5h931oo=c3h6cho-3+ch2o	1.70E+09	1.0	13200
6952.	c5h931oo+ho2=c5h931ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
6953.	c5h931oo+ch3o2=>c5h931o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
6954.	c5h931ooh=c5h931o+oh	1.50E+16	0.0	42500
6955.	c4h7-1+ch2o=c5h913o	1.50E+11	0.0	18900

6956.	c5h924oo=ch3chcho+ch3cho	1.70E+09	1.0	13200
6957.	c5h924oo+ho2=c5h924ooh+o2	2.29E+11	0.0	-1790
6958.	c5h924oo+ch3o2=>c5h924o+ch3o+o2	1.40E+16	-1.6	1860
6959.	c5h924ooh=c5h924o+oh	1.50E+16	0.0	42500
6960.	c3h5-s+ch3cho=c5h924o	1.50E+11	0.0	18900
6961.	nc4h5+ch3=c5h813	2.00E+13	0.0	0
6962.	c3h5-s+c2h3=c5h813	1.00E+13	0.0	0
6963.	c3h5-a+c2h3=c5h813	1.00E+13	0.0	0
6964.	ic4h5+ch3=c5h813	4.80E+37	-7.6	11359
6965.	c5h813+o2=c5h7+ho2	1.95E+12	0.0	39000
6966.	c5h813+o2=c2h3cho+ch3cho	2.00E+08	1.5	30200
6967.	c5h813+o2=ch2o+ac3h5cho	2.00E+08	1.5	30200
6968.	c5h813+ho2=>c2h3cho+c2h4+oh	5.00E+11	0.0	19000
6969.	c5h813+ho2=>c4h6+ch2o+oh	5.00E+11	0.0	19000
6970.	c5h813+oh=ch3cho+c3h5-a	6.00E+12	0.0	-393
6971.	c5h813+oh=c2h5+c2h3cho	6.00E+12	0.0	-393
6972.	c5h813+oh=ch3+ac3h5cho	6.00E+12	0.0	-393
6973.	c5h813+oh=ch2o+c4h7-3	6.00E+12	0.0	-393
6974.	c5h813+o=c2h3cho+c2h4	4.50E+08	1.4	-858
6975.	c5h813+o=ch2o+c4h6	4.50E+08	1.4	-858
6976.	c5h813+h=c5h7+h2	7.00E+06	2.0	0
6977.	c5h813+h=c3h5-s+c2h4	3.35E+08	1.5	2000
6978.	c5h813+oh=c5h7+h2o	7.00E+06	2.0	0
6979.	c5h813+ho2=c5h7+h2o2	2.00E+11	0.0	12600
6980.	c5h813+ch3=c5h7+ch4	2.00E+14	0.0	22800
6981.	c5h813+ho2=c5h924+o2	1.02E+12	0.0	22654
6982.	c5h813+ho2=c5h913+o2	1.02E+12	0.0	22654
6983.	c5h7+o=c2h3cho+c2h3	2.00E+14	0.0	0
6984.	c5h7+h=c5h813	1.00E+14	0.0	0
6985.	nc4h9cho+o2=nc4h9co+ho2	2.00E+13	0.5	42200
6986.	nc4h9cho+oh=nc4h9co+h2o	2.69E+10	0.8	-340
6987.	nc4h9cho+h=nc4h9co+h2	4.00E+13	0.0	4200
6988.	nc4h9cho+o=nc4h9co+oh	5.00E+12	0.0	1790
6989.	nc4h9cho+ho2=nc4h9co+h2o2	2.80E+12	0.0	13600
6990.	nc4h9cho+ch3=nc4h9co+ch4	1.70E+12	0.0	8440
6991.	nc4h9cho+ch3o=nc4h9co+ch3oh	1.15E+11	0.0	1280
6992.	nc4h9cho+ch3o2=nc4h9co+ch3o2h	1.00E+12	0.0	9500
6993.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-1+h2o	5.27E+09	1.0	1586
6994.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-2+h2o	4.67E+07	1.6	-35
6995.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-3+h2o	4.67E+07	1.6	-35
6996.	nc4h9cho+oh=c4h8cho-4+h2o	2.70E+09	1.0	-149
6997.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-1+h2o2	9.03E-01	3.6	7153
6998.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-2+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
6999.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-3+h2o2	1.47E+04	2.6	13910
7000.	nc4h9cho+ho2=c4h8cho-4+h2o2	3.61E+03	2.5	10530
7001.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-1+ch3o2h	6.03E+12	0.0	19380
7002.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-2+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
7003.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-3+ch3o2h	9.63E+03	2.6	13910
7004.	nc4h9cho+ch3o2=c4h8cho-4+ch3o2h	9.63E+03	2.6	11510
7005.	nc4h9co=pc4h9+co	1.83E+15	-0.7	12910
7006.	c4h8cho-4=c2h3cho+c2h5	7.40E+11	0.0	21970
7007.	c4h8cho-3=ch3+ac3h5cho	3.17E+14	-0.4	29900
7008.	c4h8cho-3=c4h8-1+hco	8.25E+12	-0.2	21900
7009.	c4h8cho-2=c3h6+ch2cho	7.40E+11	0.0	21970
7010.	c4h8cho-1=c2h4+c2h4cho	7.40E+11	0.0	21970
7011.	c6h13-1=c6h13-2	1.70E+07	1.0	12000
7012.	c6h13-1=c6h13-3	9.90E+07	1.0	17300
7013.	c6h13-2+o2=>ch3cho+c4h8-1+oh	2.10E+11	0.0	6858
7014.	c6h13-2+ho2=>ch3cho+pc4h9+oh	1.00E+13	0.0	0
7015.	c6h13-2+oh=c6h12-1+h2o	3.64E+13	0.0	0
7016.	c6h13-2+o=ch3cho+pc4h9	1.61E+13	0.0	0
7017.	c6h13-2=c3h6+nc3h7	2.00E+13	0.0	28700
7018.	c6h13-2=c6h12-1+h	2.00E+13	0.0	40400
7019.	c6h13-2+o2=c6h12-1+ho2	8.07E+11	0.0	5000
7020.	c6h13-2+ch3=c6h12-1+ch4	1.00E+12	0.0	0
7021.	c6h13-2+c2h5=c6h12-1+c2h6	1.00E+12	0.0	0
7022.	c6h13-2+c2h3=c6h12-1+c2h4	1.00E+12	0.0	0
7023.	c6h13-2+c3h5-a=c6h12-1+c3h6	1.00E+12	0.0	0
7024.	c6h13-3=c5h10-1+ch3	2.00E+13	0.0	31000
7025.	c6h13-3=c4h8-1+c2h5	6.00E+13	0.0	29700
7026.	c6h13-1+o=c5h11-1+ch2o	1.61E+13	0.0	0
7027.	c6h13-1=c2h4+pc4h9	2.00E+13	0.0	28700
7028.	c6h13-1+h=c6h12-1+h2	1.81E+12	0.0	0
7029.	c6h13-1=c6h12-1+h	1.30E+13	0.0	39000
7030.	c6h13-1+o2=c6h12-1+ho2	1.95E+12	0.0	5000
7031.	c6h13-1+oh=c6h12-1+h2o	2.43E+13	0.0	0
7032.	c6h13-1+ch3=c6h12-1+ch4	1.00E+12	0.0	0
7033.	c6h13-1+c2h5=c6h12-1+c2h6	1.00E+12	0.0	0

```
7034. c6h13-1+c2h3=c6h12-1+c2h4                          1.00E+12    0.0        0
7035. c6h13-1+c3h5-a=c6h12-1+c3h6                        1.00E+12    0.0        0
7036. c6h12-1=nc3h7+c3h5-a                               1.00E+16    0.0    70746
7037. c2h3+pc4h9=c6h12-1                                 1.00E+13    0.0        0
7038. c6h12-1=c3h6+c3h6                                  4.00E+12    0.0    57430
7039. c6h12-1+o2=c6h1116+ho2                             2.10E+13    0.0    51300
7040. c6h12-1+o2=c6h1115+ho2                             2.80E+13    0.0    48300
7041. c6h12-1+o2=c6h1114+ho2                             2.80E+13    0.0    48300
7042. c6h12-1+o2=c6h1113+ho2                             4.00E+12    0.0    40000
7043. c6h12-1+o=c6h1116+oh                               4.15E+02    3.5     3092
7044. c6h12-1+o=c6h1115+oh                               2.25E+03    3.3     1653
7045. c6h12-1+o=c6h1114+oh                               2.25E+03    3.3     1653
7046. c6h12-1+o=c6h1113+oh                               4.00E+13    0.0     4000
7047. c6h12-1+h=c6h1116+h2                               2.80E+07    2.0     7700
7048. c6h12-1+h=c6h1115+h2                               9.10E+06    0.0     5000
7049. c6h12-1+h=c6h1114+h2                               9.10E+06    0.0     5000
7050. c6h12-1+h=c6h1113+h2                               6.55E+12    0.0     4445
7051. c6h12-1+oh=c6h1116+h2o                             2.85E+05    2.3      216
7052. c6h12-1+oh=c6h1115+h2o                             6.35E+06    2.0     -500
7053. c6h12-1+oh=c6h1114+h2o                             6.35E+06    2.0     -500
7054. c6h12-1+oh=c6h1113+h2o                             6.00E+13    0.0     1230
7055. c6h12-1+ho2=c6h1116+h2o2                           5.60E+12    0.0    19400
7056. c6h12-1+ho2=c6h1114+h2o2                           6.80E+12    0.0    17000
7057. c6h12-1+ho2=c6h1115+h2o2                           6.80E+12    0.0    17000
7058. c6h12-1+ho2=c6h1113+h2o2                           1.00E+11    0.0    17060
7059. c6h12-1+ch3=c6h1116+ch4                            1.47E+12    0.0    11722
7060. c6h12-1+ch3=c6h1115+ch4                            6.60E+11    0.0    10120
7061. c6h12-1+ch3=c6h1114+ch4                            6.60E+11    0.0    10120
7062. c6h12-1+ch3=c6h1113+ch4                            2.00E+11    0.0     6800
7063. c6h12-1+c2h3=c6h1113+c2h4                          2.00E+11    0.0     6800
7064. c6h12-1+c2h3=c6h1114+c2h4                          6.60E+12    0.0    10120
7065. c6h12-1+c2h3=c6h1115+c2h4                          6.60E+12    0.0    10120
7066. c6h12-1+c2h3=c6h1116+c2h4                          2.94E+12    0.0    11722
7067. c6h1113+h=c6h12-1                                  1.00E+13    0.0        0
7068. c6h12-1+nc3h7=c6h1113+c3h8                         1.00E+11    0.0     8300
7069. ic3h7+c6h12-1=c3h8+c6h1113                         2.00E+11    0.0     6800
7070. c6h12-1+o=c5h11-1+hco                              1.00E+11    0.0    -1050
7071. c6h12-1+oh=c5h11-1+ch2o                            1.00E+11    0.0    -4000
7072. c6h1113+ho2=>nc3h7+c2h3cho+oh                      1.00E+12    0.0     8000
7073. c6h1116=c6h1113                                    1.00E+12    0.0    29880
7074. c6h1116=c6h1112                                    1.00E+11    0.0    20320
7075. c6h1112=c6h1115                                    2.00E+11    0.0    18100
7076. c6h1112=nc3h7+c3h4-a                               1.00E+12    0.0    33000
7077. c6h1113=c2h5+c4h6                                  4.00E+10    0.0    38250
7078. c6h1113=c5h813+ch3                                 1.00E+12    0.0    50000
7079. c6h1114=c2h3+c4h8-1                                4.00E+13    0.0    35500
7080. c6h1115=c3h5-a+c3h6                                4.00E+13    0.0    35500
7081. c6h1013=c2h2+c4h8-1                                1.00E+14    0.0    75000
7082. c5h11cho+oh=c5h11co+h2o                            2.69E+10    0.8     -340
7083. c5h11cho+h=c5h11co+h2                              4.00E+13    0.0     4200
7084. c5h11cho+o=c5h11co+oh                              5.00E+12    0.0     1790
7085. c5h11cho+ho2=c5h11co+h2o2                          2.80E+12    0.0    13600
7086. c5h11cho+ch3=c5h11co+ch4                           1.70E+12    0.0     8440
7087. c5h11cho+ch3o=c5h11co+ch3oh                        1.15E+11    0.0     1280
7088. c5h11cho+ch3o2=c5h11co+ch3o2h                      1.00E+12    0.0     9500
7089. c5h11co=>c5h11-1+co                                1.83E+15   -0.7    12910
7090. butyne+oh=ch3chcch+h2o                             1.00E+07    2.0     2000
7091. c4h612+oh=ch3ccch2+h2o                             1.00E+07    2.0     2000
7092. c4h612+oh=ch3chcch+h2o                             2.00E+07    2.0     2500
7093. c4h612+h=ch3ccch2+h2                               1.50E+07    2.0     6000
7094. c4h612+h=ch3chcch+h2                               3.00E+07    2.0     6500
7095. ch3chcch+h=ch3+c3h3                                1.00E+14    0.0        0
7096. ch3chcch+oh=c4h4+h2o                               3.00E+13    0.0        0
7097. ic4h5+h=ch3ccch2+h                                 3.00E+13    0.0        0
7098. ch3ccch2+h=ch3+c3h3                                1.00E+14    0.0        0
7099. ch3ccch2+o2=ch3co+ch2co                            4.16E+10    0.0     2510
7100. ch3ccch2+h=h2cccch2+h2                             1.00E+14    0.0     8000
7101. ch3ccch2+oh=h2cccch2+h2o                           1.00E+13    0.0        0
7102. ch3chcch(+M)=c4h4+h(+M)                            1.00E+13    0.0    49000
      Low pressure limit: 0.20000E+15  0.00000E+00  0.41000E+05
7103. ch3ccch2(+M)=h2cccch2+h(+M)                        1.00E+13    0.0    56000
      Low pressure limit: 0.20000E+15  0.00000E+00  0.48000E+05
7104. h2cccch2+oh=ic4h3+h2o                              2.00E+07    2.0     2000
7105. h2cccch2+h=ic4h3+h2                                3.00E+07    2.0     6000
7106. c4h2+ch2=c5h3+h                                    1.30E+13    0.0     4326
7107. c4h2+ch=c5h2+h                                     1.00E+14    0.0        0
7108. c4h2+ch2(s)=c5h3+h                                 3.00E+13    0.0        0
7109. ch+ch2o=ch2co+h                                    9.46E+13    0.0     -515
```

```
7110. c2h3+ch3=c3h5-a+h                                  4.73E+02    3.7     5677
7111. c2h3+c2h3=ic4h5+h                                  7.00E+13    0.0        0
7112. ch2cho+h=ch2co+h2                                  4.00E+13    0.0        0
7113. ch2cho+ch3=>c2h5+co+h                              4.90E+14   -0.5        0
7114. hcco+o=ch+co2                                      2.95E+13    0.0     1113
7115. c3h6+h=c2h4+ch3                                    7.23E+12    0.0     1302
7116. c3h6+hco=c3h5-a+ch2o                               1.08E+07    1.9    17010
7117. c3h3+c2h3=c5h5+h                                   9.63E+40   -7.8    28820
7118. c4h612+oh=ic4h5+h2o                                2.00E+07    2.0     1000
7119. c4h612+h=ic4h5+h2                                  5.00E+07    2.0     5000
7120. ic4h5+h=ch3+c3h3                                   1.00E+14    0.0        0
7121. ic4h3+c2h2=c6h5                                    3.00E+11    0.0    14900
7122. c2h5oh(+M)=ch3+ch2oh(+M)                           5.94E+23   -1.7    91163
      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+0
         h2o               Enhanced by    5.000E+00
         h2                Enhanced by    2.000E+00
         co2               Enhanced by    3.000E+00
         co                Enhanced by    2.000E+00
7123. c2h5oh(+M)=c2h5+oh(+M)                             1.25E+23   -1.5    96005
      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+0
         h2o               Enhanced by    5.000E+00
         h2                Enhanced by    2.000E+00
         co2               Enhanced by    3.000E+00
         co                Enhanced by    2.000E+00
7124. c2h5oh(+M)=c2h4+h2o(+M)                            2.79E+13    0.1    66136
      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+0
         h2o               Enhanced by    5.000E+00
7125. c2h5oh(+M)=ch3cho+h2(+M)                           7.24E+11    0.1    91007
      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+0
         h2o               Enhanced by    5.000E+00
7126. c2h5oh+oh=pc2h4oh+h2o                              6.20E+03    2.7     -576
7127. c2h5oh+oh=ch3choh+h2o                              1.31E+05    2.4    -1457
7128. c2h5oh+oh=ch3ch2o+h2o                              2.81E+02    3.0     -580
7129. c2h5oh+h=pc2h4oh+h2                                1.88E+03    3.2     7150
7130. c2h5oh+h=ch3choh+h2                                1.79E+05    2.5     3420
7131. c2h5oh+h=ch3ch2o+h2                                5.55E-23   10.6    -4459
7132. c2h5oh+o=pc2h4oh+oh                                9.69E+02    3.2     4658
7133. c2h5oh+o=ch3choh+oh                                1.45E+05    2.4      876
7134. c2h5oh+o=ch3ch2o+oh                                1.46E-03    4.7     1727
7135. c2h5oh+ch3=pc2h4oh+ch4                             3.30E+02    3.3    12291
7136. c2h5oh+ch3=ch3choh+ch4                             1.99E+01    3.4     7635
7137. c2h5oh+ch3=ch3ch2o+ch4                             2.04E+00    3.6     7722
7138. c2h5oh+ho2=ch3choh+h2o2                            8.20E+03    2.5    10750
7139. c2h5oh+ho2=pc2h4oh+h2o2                            1.23E+04    2.5    15750
7140. c2h5oh+ho2=ch3ch2o+h2o2                            2.50E+12    0.0    24000
7141. ch3ch2o+M=ch3cho+h+M                               1.16E+35   -5.9    25274
7142. ch3ch2o+M=ch3+ch2o+M                               1.35E+38   -7.0    23800
7143. ch3ch2o+o2=ch3cho+ho2                              4.00E+10    0.0     1100
7144. ch3ch2o+co=c2h5+co2                                4.68E+02    3.2     5380
7145. ch3ch2o+h=ch3+ch2oh                                3.00E+13    0.0        0
7146. ch3ch2o+h=c2h4+h2o                                 3.00E+13    0.0        0
7147. ch3ch2o+oh=ch3cho+h2o                              1.00E+13    0.0        0
7148. ch3choh+o2=ch3cho+ho2                              1.00E+13    0.0     5564
7149. ch3choh+ch3=c3h6+h2o                               1.00E+13    0.0        0
7150. ch3choh+o=ch3cho+oh                                1.00E+14    0.0        0
7151. ch3choh+h=c2h4+h2o                                 3.00E+13    0.0        0
7152. ch3choh+h=ch3+ch2oh                                3.00E+13    0.0        0
7153. ch3choh+ho2=ch3cho+oh+oh                           4.00E+13    0.0        0
7154. ch3choh+oh=ch3cho+h2o                              5.00E+12    0.0        0
7155. ch3choh+M=ch3cho+h+M                               1.00E+14    0.0    25000
7156. nc3h7(+M)=c2h4+ch3(+M)                             1.23E+13   -0.1    30202
      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+0
         h2o               Enhanced by    5.000E+00
         h2                Enhanced by    2.000E+00
         co2               Enhanced by    3.000E+00
         co                Enhanced by    2.000E+00
7157. c2h3+c2h2(+M)=ic4h5(+M)                            1.00E+04    2.4    17900
      Low pressure limit: 0.26000E+39 -0.74100E+01  0.75000E+04
7158. ic4h5(+M)=c4h4+h(+M)                               1.00E+14    0.0    50000
      Low pressure limit: 0.20000E+16  0.00000E+00  0.42000E+05
7159. nc4h5(+M)=c4h4+h(+M)                               1.00E+14    0.0    37000
      Low pressure limit: 0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
7160. c2h2+nc4h5(+M)=c6h7c(+M)                           4.80E+07    0.3     4700
```

```
      Low pressure limit: 0.52000E+26 -0.42100E+01  0.40000E+04
7161. ic4h3(+M)=c4h2+h(+M)                               1.00E+14    0.0    55000
      Low pressure limit: 0.25000E+16  0.00000E+00  0.48000E+05
7162. nc4h3(+M)=c4h2+h(+M)                               1.00E+14    0.0    36000
      Low pressure limit: 0.10000E+15  0.00000E+00  0.30000E+05
7163. ch3+oh=ch2oh+h                                     1.99E+19   -1.7    11157
7164. ch3+oh=ch3o+h                                      9.95E+14   -0.8    16872
7165. ch3+oh=ch2(s)+h2o                                  6.37E+18   -1.7    11141
7166. ch3+oh=ch2o+h2                                     7.39E+14   -1.1    14551
7167. c2h5+o2=c2h4+ho2                                   1.01E+31   -5.8    15860
7168. c2h5+o2=c2h4o2h                                    2.37E+42   -9.7    16150
7169. c2h5+o2=ch3cho+oh                                  6.93E+17   -2.2    14020
7170. c2h3+o2=ch2cho+o                                   1.18E+17   -1.4     5580
7171. c2h3+o2=ch2o+hco                                   9.27E+25   -4.0     7043
7172. c2h3+o2=chocho+h                                   7.78E+20   -2.9     5541
7173. c2h3+o2=c2h2+ho2                                   3.25E+19   -2.3     7932
7174. c2h2+ch3=c3h4-p+h                                  3.35E+06    1.9    14182
7175. c2h2+ch3=c3h5-a                                    2.75E+05    1.8    16691
7176. c2h2+ch3=c3h5-s                                    6.58E+41   -9.2    18137
7177. c3h4-a=c3h4-p                                      3.10E+65  -15.1    93814
      Declared duplicate reaction...
7178. c3h5-a+o2=c2h3cho+oh                               2.47E+13   -0.5    23017
7179. c3h5-a+o2=c3h4-a+ho2                               2.18E+21   -2.9    30755
7180. c3h5-a+o2=ch2cho+ch2o                              7.14E+15   -1.2    21046
7181. c3h5-a+o2=c2h2+ch2o+oh                             3.29E+49   -5.7    21450

Note: Expression d'Arrhenius modifiee: k = A T**b exp(-E/RT); les unites sont
mole-cm-sec-K pour A et cal/mole pour E

thermo
   300.000  1000.000  5000.000
c5h9-15    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
c4h7-14                   c   4h   7o   0    0G   300.000   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
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
c9h17-13                  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
c9h17-24    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
c9h17-35    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
c9h17-46    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
noncy1o2    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
noncy2o3    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
noncy3o4    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
noncy4o5    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
md10ooh10j                c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.71172974E+02 0.28862357E-02-0.82354376E-07-0.47289637E-11 0.59072935E-15    2
-0.88953531E+05-0.33855215E+03 0.30132730E+01 0.13817875E+00-0.96403637E-04    3
 0.40389317E-07-0.11190628E-10-0.64193258E+05 0.34479656E+02                   4
md9ooh9j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.37734439E+01 0.10429750E+00-0.40275718E-04 0.70283694E-08-0.46106342E-12    2
-0.64039672E+05 0.43308914E+02-0.18584074E+01 0.16744453E+00-0.14658566E-03    3
 0.65128127E-07-0.98394036E-11-0.67193961E+05 0.55198307E+02                   4
md8ooh8j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md7ooh7j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md6ooh6j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md5ooh5j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md4ooh4j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md3ooh3j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.40539494E+01 0.10372681E+00-0.39993378E-04 0.69743309E-08-0.45744577E-12    2
-0.63823133E+05 0.41180817E+02-0.27918279E+01 0.17408127E+00-0.16139465E-03    3
 0.78601154E-07-0.14265405E-10-0.66832602E+05 0.58392338E+02                   4
md2ooh2j                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.52062218E+02 0.28630508E-01-0.65610684E-05 0.79093532E-09-0.40465678E-13    2
-0.84811062E+05-0.23141515E+03-0.53162819E+00 0.15574077E+00-0.12010036E-03    3
 0.49448889E-07-0.96652426E-11-0.68165453E+05 0.47736538E+02                   4
mdmoohmj                  c  11h  21o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.95654650E+01 0.93388610E-01-0.34697117E-04 0.58940084E-08-0.37948068E-12    2
-0.66375688E+05 0.10671860E+02-0.54642677E+01 0.17749181E+00-0.15602719E-03    3
 0.67536078E-07-0.98268858E-11-0.66475234E+05 0.72869911E+02                   4
oct1*o                    c   8h  16o   1   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.90905323E+01 0.60960777E-01-0.22907618E-04 0.39229673E-08-0.25403808E-12    2
-0.40374816E+05-0.90671387E+01-0.26937656E-02 0.93651518E-01-0.56777913E-04    3
 0.12817670E-07 0.10710891E-11-0.38825566E+05 0.34694866E+02                   4
oct2*o                    c   8h  16o   1   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.10360220E+02 0.58671959E-01-0.21760678E-04 0.36927139E-08-0.23762332E-12    2
-0.44579344E+05-0.16794594E+02-0.18944134E+00 0.92598811E-01-0.54546559E-04    3
 0.11693560E-07 0.11221419E-11-0.42336645E+05 0.35539082E+02                   4
oct3*o                    c   8h  16o   1   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.24387968E+01 0.80259092E-01-0.32606215E-04 0.58975909E-08-0.39685114E-12    2
-0.39552082E+05 0.54987869E+02-0.73139918E+00 0.97668268E-01-0.64108455E-04    3
 0.16918873E-07 0.86763002E-12-0.42471539E+05 0.37545647E+02                   4
oct4*o                    c   8h  16o   1   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.24387968E+01 0.80259092E-01-0.32606215E-04 0.58975909E-08-0.39685114E-12    2
-0.39552082E+05 0.54987869E+02-0.73139918E+00 0.97668268E-01-0.64108455E-04    3
 0.16918873E-07 0.86763002E-12-0.42471539E+05 0.37545647E+02                   4
md9*o                     c  11h  20o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.35718372E+01 0.11244429E+00-0.46337595E-04 0.84649781E-08-0.57360979E-12    2
-0.83575016E+05 0.75999077E+02-0.12221661E+01 0.14130946E+00-0.96598284E-04    3
 0.24511891E-07 0.22692924E-11-0.88184016E+05 0.49973614E+02                   4
md8*o                     c  11h  20o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088777E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md7*o                     c  11h  20o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088777E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md6*o                     c  11h  20o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
```

```
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088778E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md5*o          c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000                1
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088778E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md3*o          c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000                1
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088778E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md2*o          c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000                1
-0.17032389E+02 0.13586538E+00-0.58703492E-04 0.11088778E-07-0.76962948E-12    2
-0.78393328E+05 0.15114830E+03-0.20405426E+01 0.14830934E+00-0.11082565E-03    3
 0.34416910E-07 0.35236459E-12-0.88289539E+05 0.53148876E+02                   4
md2oh6j     02/03/10    c  11h  21o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49297127E+02 0.28516766E-01-0.65077443E-05 0.77747198E-09-0.39284944E-13    2
-0.87105922E+05-0.21757809E+03-0.19356443E+01 0.15169565E+00-0.11669893E-03    3
 0.48830003E-07-0.98401634E-11-0.70785164E+05 0.54674759E+02                   4
md2oh5j     02/03/10    c  11h  21o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49297127E+02 0.28516766E-01-0.65077443E-05 0.77747198E-09-0.39284944E-13    2
-0.87105922E+05-0.21757809E+03-0.19356443E+01 0.15169565E+00-0.11669893E-03    3
 0.48830003E-07-0.98401634E-11-0.70785164E+05 0.54674759E+02                   4
md2oh4j     02/03/10    c  11h  21o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49297127E+02 0.28516766E-01-0.65077443E-05 0.77747198E-09-0.39284944E-13    2
-0.87105922E+05-0.21757809E+03-0.19356443E+01 0.15169565E+00-0.11669893E-03    3
 0.48830003E-07-0.98401634E-11-0.70785164E+05 0.54674759E+02                   4
md2ohmj     02/03/10    c  11h  21o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49732422E+02 0.28341752E-01-0.64619862E-05 0.76910806E-09-0.38629591E-13    2
-0.86558500E+05-0.22028365E+03-0.17488128E+01 0.14942668E+00-0.10858718E-03    3
 0.39940559E-07-0.66890421E-11-0.70040789E+05 0.53919254E+02                   4
md2oh6oo    02/03/10    c  11h  21o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.71703461E+02 0.61226580E-02-0.44233559E-06 0.16360477E-10-0.98185902E-16    2
-0.11483354E+06-0.34061002E+03 0.14797145E+01 0.14454930E+00-0.84239859E-04    3
 0.16489992E-07-0.88282859E-12-0.89832469E+05 0.42680054E+02                   4
md2oh5oo    02/03/10    c  11h  21o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.71703461E+02 0.61226580E-02-0.44233559E-06 0.16360477E-10-0.98185902E-16    2
-0.11483354E+06-0.34061002E+03 0.14797145E+01 0.14454930E+00-0.84239859E-04    3
 0.16489992E-07-0.88282859E-12-0.89832469E+05 0.42680054E+02                   4
md2oh4oo    02/03/10    c  11h  21o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.71703461E+02 0.61226580E-02-0.44233559E-06 0.16360477E-10-0.98185902E-16    2
-0.11483354E+06-0.34061023E+03 0.14797145E+01 0.14454930E+00-0.84239859E-04    3
 0.16489992E-07-0.88282859E-12-0.89832469E+05 0.42679825E+02                   4
md2ohmoo    02/03/10    c  11h  21o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.73024261E+02 0.37451070E-02-0.16897216E-06 0.27059841E-11 0.13734692E-15    2
-0.11689036E+06-0.34928653E+03-0.12159882E+01 0.14913861E+00-0.83889026E-04    3
 0.10829045E-07 0.17289397E-11-0.90492516E+05 0.55972511E+02                   4
c9h19-4     16/02/10    c   9h  19o   0   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26060333E+02 0.40333696E-01-0.11825125E-04 0.16999763E-08-0.97626314E-13    2
-0.16370930E+05-0.10436630E+03-0.22578375E+01 0.11566918E+00-0.90114809E-04    3
 0.42306123E-07-0.94330958E-11-0.79083804E+04 0.44549618E+02                   4
c9h19-5     16/02/10    c   9h  19o   0   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26060333E+02 0.40333696E-01-0.11825125E-04 0.16999763E-08-0.97626314E-13    2
-0.16370930E+05-0.10436630E+03-0.22578375E+01 0.11566918E+00-0.90114809E-04    3
 0.42306123E-07-0.94330958E-11-0.79083804E+04 0.43856541E+02                   4
non1o2      16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.29058764E+02 0.43619800E-01-0.13088868E-04 0.19151933E-08-0.11143151E-12    2
-0.33326258E+05-0.11486019E+03-0.85370106E+00 0.11885505E+00-0.77814781E-04    3
 0.23107605E-07-0.19103304E-11-0.24394438E+05 0.42281082E+02                   4
non2o2      16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52237156E+02 0.10556360E-01-0.13692958E-05 0.99816294E-10-0.32866551E-14    2
-0.45713477E+05-0.24729044E+03 0.90958726E+00 0.11025486E+00-0.61842926E-04    3
 0.14167264E-07-0.19685492E-11-0.27201092E+05 0.33608334E+02                   4
non3o2      16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52237156E+02 0.10556360E-01-0.13692958E-05 0.99816294E-10-0.32866551E-14    2
-0.45441863E+05-0.24729211E+03 0.98424244E+00 0.10974009E+00-0.60614286E-04    3
 0.12948483E-07-0.15396712E-11-0.26937377E+05 0.33290462E+02                   4
non4o2      16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52237156E+02 0.10556360E-01-0.13692958E-05 0.99816294E-10-0.32866551E-14    2
-0.45441867E+05-0.24729257E+03 0.98424244E+00 0.10974009E+00-0.60614286E-04    3
 0.12948483E-07-0.15396712E-11-0.26937379E+05 0.33290001E+02                   4
non5o2      16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52237156E+02 0.10556360E-01-0.13692958E-05 0.99816294E-10-0.32866551E-14    2
-0.45441867E+05-0.24729257E+03 0.98424244E+00 0.10974009E+00-0.60614286E-04    3
```

```
 0.12948483E-07-0.15396712E-11-0.26937379E+05 0.33290001E+02                   4
non1o2h3j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.29680091E+02 0.41670052E-01-0.12143591E-04 0.17379955E-08-0.99359499E-13    2
-0.27452924E+05-0.11404580E+03-0.57101625E+00 0.12617373E+00-0.10299717E-03    3
 0.48783857E-07 0.10543334E-10-0.18841082E+05 0.42778671E+02                   4
non2o2h4j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52176769E+02 0.99439938E-02-0.12386784E-05 0.90972098E-10-0.32409115E-14    2
-0.39594340E+05-0.24274733E+03 0.10758094E+01 0.11839948E+00-0.89050838E-04    3
 0.41901604E-07 0.11340823E-10-0.21635543E+05 0.34593719E+02                   4
non3o2h1j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52563820E+02 0.98547451E-02-0.12439663E-05 0.95292170E-10-0.36747796E-14    2
-0.38403750E+05-0.24518448E+03 0.14090639E+01 0.11512641E+00-0.78553865E-04    3
 0.30655521E-07-0.73632359E-11-0.20283002E+05 0.33216480E+02                   4
non3o2h5j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non4o2h2j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52087082E+02 0.10116814E-01-0.12732683E-05 0.93563692E-10-0.32948146E-14    2
-0.39329977E+05-0.24234097E+03 0.21854873E+01 0.11054188E+00-0.71320588E-04    3
 0.25530634E-07-0.58972059E-11-0.21472293E+05 0.29960089E+02                   4
non4o2h6j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non5o2h3j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non5o2h7j   16/02/10    c   9h  19o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non1o2h3o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.55863358E+02 0.11867384E-01-0.16749163E-05 0.14080997E-09-0.57844778E-14    2
-0.56522289E+05-0.25768994E+03 0.29470236E+01 0.11833763E+00-0.68931615E-04    3
 0.14883003E-07-0.10458649E-11-0.37899715E+05 0.30347210E+02                   4
non2o2h4o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17299904E+02 0.70571907E-01-0.25131985E-04 0.41460950E-08-0.26167683E-12    2
-0.42768512E+05-0.39703293E+02-0.25111416E+00 0.13803823E+00-0.10186742E-03    3
 0.31676151E-07-0.10160454E-11-0.40103816E+05 0.43448154E+02                   4
non3o2h3o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.55863358E+02 0.11867384E-01-0.16749163E-05 0.14080997E-09-0.57844778E-14    2
-0.56522289E+05-0.25838300E+03 0.29470236E+01 0.11833763E+00-0.68931615E-04    3
 0.14883003E-07-0.10458649E-11-0.37899715E+05 0.29654165E+02                   4
non3o2h5o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17239336E+02 0.70661046E-01-0.25158568E-04 0.41476893E-08-0.26153911E-12    2
-0.42472801E+05-0.39362274E+02-0.53502660E-01 0.13665919E+00-0.98528137E-04    3
 0.28310804E-07 0.18764917E-12-0.39853125E+05 0.42612400E+02                   4
non4o2h2o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17299904E+02 0.70571907E-01-0.25131985E-04 0.41460950E-08-0.26167683E-12    2
-0.42768852E+05-0.40395111E+02-0.41691814E-01 0.13658880E+00-0.98393110E-04    3
 0.28215588E-07 0.20619034E-12-0.40126277E+05 0.41869930E+02                   4
non4o2h6o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17299904E+02 0.70571907E-01-0.25131985E-04 0.41460950E-08-0.26167683E-12    2
-0.42768852E+05-0.40395111E+02-0.41691814E-01 0.13658880E+00-0.98393110E-04    3
 0.28215588E-07 0.20619034E-12-0.40126277E+05 0.41869930E+02                   4
non5o2h3o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17299904E+02 0.70571907E-01-0.25131985E-04 0.41460950E-08-0.26167683E-12    2
-0.42768852E+05-0.40395111E+02-0.41691814E-01 0.13658880E+00-0.98393110E-04    3
 0.28215588E-07 0.20619034E-12-0.40126277E+05 0.41869930E+02                   4
non5o2h7o2  16/02/10    c   9h  19o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17239336E+02 0.70661046E-01-0.25158568E-04 0.41476893E-08-0.26153911E-12    2
-0.42472660E+05-0.39361130E+02-0.12826003E+00 0.13717467E+00-0.99758443E-04    3
 0.29531236E-07-0.24180801E-12-0.39845082E+05 0.42930180E+02                   4
non3o2h1*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non4o2h2*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non1o2h3*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non5o2h3*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non2o2h4*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non3o2h5*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non7o2h5*o  16/02/10    c   9h  18o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non1o2h     16/02/10    c   9h  20o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.27999147E+02 0.48154842E-01-0.15367057E-04 0.23461373E-08-0.14036019E-12    2
-0.50680945E+05-0.10743922E+03 0.63203967E+00 0.11388124E+00-0.64464650E-04    3
 0.10834405E-07 0.20848284E-11-0.42378277E+05 0.37042747E+02                   4
non2o2h     16/02/10    c   9h  20o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.52552689E+02 0.12292847E-01-0.18977114E-05 0.16954796E-09-0.71385548E-14    2
-0.63542000E+05-0.24733365E+03 0.23825750E+01 0.10538419E+00-0.48774335E-04    3
 0.22046358E-08 0.19078454E-11-0.45183781E+05 0.28419085E+02                   4
non3o2h     16/02/10    c   9h  20o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non4o2h     16/02/10    c   9h  20o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non5o2h     16/02/10    c   9h  20o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non1o       16/02/10    c   9h  19o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.25894953E+02 0.44667672E-01-0.13613899E-04 0.20127480E-08-0.11785213E-12    2
-0.32149234E+05-0.10101381E+03-0.19800333E+01 0.11283699E+00-0.68967594E-04    3
 0.17256065E-07-0.31986008E-12-0.23678105E+05 0.46016701E+02                   4
non2o       16/02/10    c   9h  19o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49341049E+02 0.31048215E-01-0.15468061E-05 0.12943718E-09-0.53168385E-14    2
-0.43568980E+05-0.23488867E+03-0.32389027E+00 0.10500190E+00-0.54879845E-04    3
 0.10232750E-07-0.10661352E-11-0.25416871E+05 0.37794853E+02                   4
non3o       16/02/10    c   9h  19o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non4o       16/02/10    c   9h  19o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
non5o       16/02/10    c   9h  19o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
oct4o       08/02/10    c   8h  17o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
oct3o       08/02/10    c   8h  17o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
oct2o       08/02/10    c   8h  17o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.45806072E+02 0.78022811E-02-0.91033729E-06 0.66051040E-10-0.25048382E-14    2
-0.39478148E+05-0.21760001E+03-0.35165992E+00 0.94740056E-01-0.51454012E-04    3
 0.12109215E-07-0.22803406E-11-0.22496639E+05 0.36135452E+02                   4
oct1o       08/02/10    c   8h  17o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.23077858E+02 0.40017333E-01-0.12140343E-04 0.17876562E-08-0.10431394E-12    2
-0.28314637E+05-0.87646324E+02-0.21339333E+01 0.10345186E+00-0.67650326E-04    3
 0.21237781E-07-0.22787809E-11-0.20744414E+05 0.44891273E+02                   4
oct4o2h     08/02/10    c   8h  18o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
oct3o2h     08/02/10    c   8h  18o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
oct2o2h     08/02/10    c   8h  18o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49120415E+02 0.88554397E-02-0.11546297E-05 0.87920414E-10-0.32100681E-14    2
-0.59489258E+05-0.23060812E+03 0.23004239E+01 0.95498212E-01-0.46248148E-04    3
 0.49757682E-08 0.37816920E-12-0.42257715E+05 0.26992285E+02                   4
oct1o2h     08/02/10    c   8h  18o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.25192181E+02 0.43487925E-01-0.13884428E-04 0.21190611E-08-0.12667054E-12    2
-0.46851066E+05-0.94127907E+02 0.65068358E+00 0.10331059E+00-0.60325459E-04    3
 0.12021079E-07 0.11090985E-11-0.39463215E+05 0.35187000E+02                   4
mhx6oo5*o   12/03/09    c   7h  11o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.10291507E+02 0.90602882E-01-0.38374405E-04 0.71477184E-08-0.49114499E-12    2
-0.61297227E+05 0.11258996E+03 0.78914511E+00 0.10704679E+00-0.91924019E-04    3
 0.34548137E-07-0.20034378E-11-0.69297609E+05 0.37623028E+02                   4
mhx6o5*o    12/03/09    c   7h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12821310E+02 0.90821937E-01-0.38688515E-04 0.72348580E-08-0.49851388E-12    2
-0.60405836E+05 0.12278720E+03-0.44746587E+00 0.10187567E+00-0.85359134E-04    3
 0.31263834E-07-0.14308343E-11-0.68570453E+05 0.41816715E+02                   4
c6h10co     12/03/09    c   7h  10o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17606289E+02 0.19745996E-01-0.50299736E-05 0.65246902E-09-0.34903588E-13    2
-0.37150234E+04-0.74714737E+02-0.63606083E+00 0.61247688E-01-0.34955319E-04    3
 0.67085479E-08 0.56963169E-12 0.21166680E+04 0.22590105E+02                   4
c6h12cho-1  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10525271E+02 0.45606140E-01-0.15788566E-04 0.25518556E-08-0.15870576E-12    2
-0.13193037E+05-0.16743576E+02-0.55165559E+00 0.90093784E-01-0.76134929E-04    3
 0.36518390E-07-0.72095997E-11-0.11325935E+05 0.35899204E+02                   4
c6h12cho-2  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.99011002E+01 0.46147704E-01-0.15984984E-04 0.25856497E-08-0.16095157E-12    2
-0.14063991E+05-0.13088135E+02 0.89400202E-01 0.86465500E-01-0.71238741E-04    3
 0.33761676E-07-0.65924111E-11-0.12500984E+05 0.33213623E+02                   4
c6h12cho-3  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10144585E+02 0.45657493E-01-0.15748818E-04 0.25407620E-08-0.15791443E-12    2
-0.14109183E+05-0.14327553E+02-0.88802391E+00 0.93394928E-01-0.86714608E-04    3
 0.47860695E-07-0.11225486E-10-0.12406496E+05 0.37288715E+02                   4
c6h12cho-4  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10144585E+02 0.45657493E-01-0.15748818E-04 0.25407620E-08-0.15791443E-12    2
-0.14109183E+05-0.14327553E+02-0.88802391E+00 0.93394928E-01-0.86714608E-04    3
 0.47860695E-07-0.11225486E-10-0.12406496E+05 0.37288715E+02                   4
c6h12cho-5  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10144585E+02 0.45657493E-01-0.15748818E-04 0.25407620E-08-0.15791443E-12    2
-0.14109183E+05-0.14327553E+02-0.88802391E+00 0.93394928E-01-0.86714608E-04    3
 0.47860695E-07-0.11225486E-10-0.12406496E+05 0.37288715E+02                   4
c6h12cho-6  12/03/09    c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.99409628E+01 0.47066778E-01-0.16549107E-04 0.27048865E-08-0.16957021E-12    2
-0.16313181E+05-0.15805031E+02-0.56411016E+00 0.89852966E-01-0.75235483E-04    3
 0.36211201E-07-0.72900843E-11-0.14591551E+05 0.33929794E+02                   4
hex2o2      05/02/09    c   6h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.40991211E+02 0.19943132E-02-0.84016193E-07 0.17504570E-11 0.20897153E-16    2
-0.33202840E+05-0.19189217E+03 0.13713942E+01 0.75728633E-01-0.42671236E-04    3
 0.10996675E-07-0.25191604E-11-0.18499338E+05 0.26315929E+02                   4
hex1o2h5j   05/02/09    c   6h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.20866947E+02 0.28413756E-01-0.80737227E-05 0.11329635E-08-0.63896669E-13    2
-0.15856734E+05-0.72042252E+02 0.10492681E+01 0.83450608E-01-0.65280648E-04    3
 0.28432323E-07-0.53655218E-11-0.10253022E+05 0.30645662E+02                   4
hex5o2h1j   05/02/09    c   6h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.41241158E+02 0.14360629E-02-0.19677760E-07-0.57615453E-11 0.54572226E-15    2
-0.26138996E+05-0.18936909E+03 0.19152002E+01 0.80284685E-01-0.58606340E-04    3
 0.26694922E-07-0.76295697E-11-0.11857613E+05 0.25737007E+02                   4
hex1o2h5o2  05/02/09    c   6h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.44889179E+02 0.28140629E-02-0.12211514E-06-0.41515658E-11 0.71426900E-15    2
-0.44387590E+05-0.20379233E+03 0.33994811E+01 0.83874136E-01-0.49906121E-04    3
 0.11855005E-07-0.16461769E-11-0.29468670E+05 0.23098951E+02                   4
hex5o2h1o2  05/02/09    c   6h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.44826054E+02 0.29268672E-02-0.18868208E-06 0.11650870E-10-0.58827354E-15    2
-0.44362602E+05-0.20344373E+03 0.35266066E+01 0.82996622E-01-0.47808917E-04    3
 0.97713846E-08-0.91172924E-12-0.29482328E+05 0.22557663E+02                   4
hex5o2h1*o  05/02/09    c   6h  12o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49626327E+02 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
hex1o2h5*o  05/02/09    c   6h  12o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      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
o2c2h4cho   02/02/09    c   3h   5o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000      1
```

```
 0.58875632E+01 0.23957998E-01-0.82996758E-05 0.13436422E-08-0.83741845E-13    2
-0.17365691E+05 0.53656540E-01 0.18369175E-01 0.45945689E-01-0.38735474E-04    3
 0.15499934E-07-0.17525060E-11-0.17368943E+05 0.22275162E+02                   4
ho2c2h4cho   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
oc2h4cho     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
mhx6oo4*o    02/02/09      c   7h  11o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18289009E+02 0.10471822E+00-0.45934845E-04 0.87705141E-08-0.61347043E-12    2
-0.58838555E+05 0.15720586E+03-0.11375626E+00 0.11032565E+00-0.94544775E-04    3
 0.33143195E-07-0.36091960E-12-0.69757891E+05 0.42165825E+02                   4
mhx6o4*o     02/02/09      c   7h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20485228E+02 0.10437756E+00-0.45972931E-04 0.88029397E-08-0.61699593E-12    2
-0.58079227E+05 0.16553891E+03-0.16685607E+01 0.10739809E+00-0.93468996E-04    3
 0.35444220E-07-0.18033669E-11-0.68997180E+05 0.47701656E+02                   4
mhx6oo3*o    02/02/09      c   7h  11o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16761990E+02 0.10235174E+00-0.44724686E-04 0.85159950E-08-0.59447353E-12    2
-0.60872031E+05 0.14868692E+03-0.27102261E+01 0.11560159E+00-0.98206467E-04    3
 0.34970761E-07-0.10606444E-11-0.70241914E+05 0.56410103E+02                   4
mhx6o3*o     02/02/09      c   7h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.19185804E+02 0.10241299E+00-0.44983663E-04 0.85972571E-08-0.60178528E-12    2
-0.60024395E+05 0.15828389E+03-0.40248847E+01 0.11098181E+00-0.92999595E-04    3
 0.33083229E-07-0.99865222E-12-0.69506531E+05 0.60932343E+02                   4
hept1o2h     25/01/09      c   7h  16o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
hept1o       25/01/09      c   7h  15o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
hex1o2       25/01/09      c   6h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.20556637E+02 0.29763455E-01-0.87254602E-05 0.12530013E-08-0.71835441E-13    2
-0.21804814E+05-0.74481735E+02-0.22412395E+00 0.83149768E-01-0.55778477E-04    3
 0.17052741E-07-0.14338784E-11-0.15710396E+05 0.34280796E+02                   4
hex1o2h      25/01/09      c   6h  14o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
hex1o        25/01/09      c   6h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
nprcoetpo2   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
nprcoetpo2h  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
nprcoetpo    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
acetoch2o2   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
acetoch2o2h  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
acetoch2o    05/12/08      c   4h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.6658327E+01 0.27749667E-01-0.94369897E-05 0.15065560E-08-0.92921114E-13    2
-0.24186270E+05-0.10899277E+01 0.54507318E-01 0.52965928E-01-0.40301915E-04    3
 0.15869045E-07-0.21622910E-11-0.23025023E+05 0.30846504E+02                   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
pent1o2h     05/12/08      c   5h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.16571697E+02 0.29835546E-01-0.96377589E-05 0.14847381E-08-0.89407621E-13    2
-0.35280719E+05-0.53079941E+02 0.11956781E+01 0.68197004E-01-0.39720635E-04    3
 0.74020328E-08 0.10759709E-11-0.30770201E+05 0.27550047E+02                   4
pent1o       05/12/08      c   5h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.14471928E+02 0.26342995E-01-0.78825942E-05 0.11507133E-08-0.66824631E-13    2
-0.16750842E+05-0.46690773E+02-0.16410366E+01 0.68704106E-01-0.47933703E-04    3
 0.17513081E-07-0.26306238E-11-0.12045895E+05 0.37464916E+02                   4
mp3oo        05/12/08      c   4h   7o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.46791658E+01 0.54733314E-01-0.22476706E-04 0.40967296E-08-0.27719656E-12    2
-0.42600344E+05 0.70012253E+02-0.44239983E+00 0.74093424E-01-0.65627064E-04    3
 0.24700984E-07-0.13978936E-11-0.47606637E+05 0.36372864E+02                   4
mp3o         05/12/08      c   4h   7o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.70215864E+01 0.54602221E-01-0.22584603E-04 0.41360573E-08-0.28074339E-12    2
-0.41778520E+05 0.79175430E+02-0.17884542E+01 0.69692180E-01-0.60943963E-04    3
 0.23332172E-07-0.15172500E-11-0.46321906E+05 0.41026379E+02                   4
mpe5oo4*o    05/12/08      c   6h   9o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.12108604E+02 0.84523477E-01-0.36413236E-04 0.68638766E-08-0.47567083E-12    2
-0.57896344E+05 0.12025305E+03 0.11872000E+01 0.93928158E-01-0.81930681E-04    3
 0.30220146E-07-0.11604949E-11-0.66424102E+05 0.34148712E+02                   4
mpe5o4*o     05/12/08      c   6h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14626092E+02 0.84740058E-01-0.36747857E-04 0.69600254E-08-0.48402666E-12    2
-0.57011117E+05 0.13037514E+03-0.78381531E-01 0.88963449E-01-0.75880867E-04    3
 0.27474091E-07-0.78797174E-12-0.65693914E+05 0.38464195E+02                   4
mpe5oo3*o    05/12/08      c   6h   9o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18299141E+02 0.95866866E-01-0.42616819E-04 0.82140295E-08-0.57845829E-12    2
-0.57592543E+05 0.15475510E+03-0.23713565E+01 0.10292790E+00-0.89375841E-04    3
 0.31902896E-07-0.69939280E-12-0.67362539E+05 0.53182274E+02                   4
mpe5o3*o     05/12/08      c   6h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20531261E+02 0.95603488E-01-0.42704727E-04 0.82586382E-08-0.58298906E-12    2
-0.56822598E+05 0.16327866E+03-0.37007763E+01 0.98413095E-01-0.84429514E-04    3
 0.30286653E-07-0.73813270E-12-0.66625602E+05 0.57766689E+02                   4
me2oo        05/12/08      c   3h   5o   4   0g   300.000  5000.000 1391.000    1
 0.12744927E+01 0.35229951E-01-0.13558230E-04 0.23608695E-08-0.15466534E-12    2
-0.41615773E+05 0.34181126E+02 0.90951335E+00 0.57333332E-01-0.52119787E-04    3
 0.20865432E-07-0.18676588E-11-0.43732172E+05 0.28139774E+02                   4
me2o         05/12/08      c   3h   5o   3   0g   300.000  5000.000 1391.000    1
-0.11299146E+01 0.35173971E-01-0.13683246E-04 0.24004192E-08-0.15806432E-12    2
-0.40763883E+05 0.43705994E+02-0.46092415E+00 0.53102292E-01-0.47845828E-04    3
 0.19902824E-07-0.21293273E-11-0.42990855E+05 0.32896420E+02                   4
mp2dmoo      05/12/08      c   4h   5o   4   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
-0.36787241E+01 0.45360524E-01-0.18114853E-04 0.32372924E-08-0.21599470E-12    2
-0.31454625E+05 0.64220840E+02-0.32058494E+01 0.75583175E-01-0.71512732E-04    3
 0.27160906E-07-0.14878903E-11-0.34966059E+05 0.49774071E+02                   4
mp2dmooh     05/12/08      c   4h   6o   4   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
-0.62669287E+01 0.53487282E-01-0.23040697E-04 0.43427710E-08-0.30093053E-12    2
-0.48351035E+05 0.79728279E+02-0.19633458E+01 0.72289646E-01-0.62182138E-04    3
 0.18883787E-07 0.10983002E-11-0.52923754E+05 0.45571724E+02                   4
mp2dmo       05/12/08      c   4h   5o   3   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
-0.60735130E+01 0.45306947E-01-0.18258230E-04 0.32837095E-08-0.22007510E-12    2
-0.30608879E+05 0.73684036E+02-0.46453214E+01 0.71824215E-01-0.68359062E-04    3
 0.27306310E-07-0.21392204E-11-0.34217250E+05 0.54823833E+02                   4
mb4oo3*o     05/12/08      c   5h   7o   5   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
-0.12346835E+02 0.76038778E-01-0.33268556E-04 0.63405845E-08-0.44293052E-12    2
-0.56555871E+05 0.11908672E+03-0.97480488E+00 0.85844778E-01-0.75056087E-04    3
 0.27217645E-07-0.85452522E-12-0.64038672E+05 0.44763157E+02                   4
mb4o3*o      05/12/08      c   5h   7o   4   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
-0.14685694E+02 0.75950004E-01-0.33441534E-04 0.64019288E-08-0.44863161E-12    2
-0.55741809E+05 0.12821127E+03-0.25037627E+01 0.82721531E-01-0.73466879E-04    3
 0.28960915E-07-0.20834421E-11-0.63280504E+05 0.50191658E+02                   4
o2prcoch3    05/12/08      c   5h   9o   3   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
```

```
 0.10545150E+02 0.34656972E-01-0.11831634E-04 0.18950372E-08-0.11719674E-12    2
-0.28338057E+05-0.16501884E+02 0.10998452E+01 0.69426738E-01-0.52406987E-04    3
 0.18969056E-07-0.19557090E-11-0.26653318E+05 0.29030167E+02                   4
etcoeto2     05/12/08      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
prcoch2o2    05/12/08      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
ho2prcoch3   05/12/08      c   5h  10o   3   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
 0.87553310E+01 0.40774632E-01-0.15195853E-04 0.25874416E-08-0.16689386E-12    2
-0.45452883E+05-0.51525879E+01 0.24895086E+01 0.65119252E-01-0.40656934E-04    3
 0.82920133E-08 0.14750121E-11-0.44626863E+05 0.24204107E+02                   4
etcoeto2h    05/12/08      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
prcoh2o2h    05/12/08      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
oprcoch3     05/12/08      c   5h   9o   2   0G   300.000  5000.000 1397.000    1
 0.82549505E+01 0.34366488E-01-0.11802034E-04 0.18970125E-08-0.11754458E-12    2
-0.27525932E+05-0.75977020E+01-0.23651019E+00 0.64951554E-01-0.47530280E-04    3
 0.17391876E-07-0.19963909E-11-0.25915537E+05 0.33643047E+02                   4
etcoeto      05/12/08      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
prcoch2o     05/12/08      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
c2h3co2   11/22/ 6         c   3h   3o   2   0G   300.000  5000.000 1397.000   11
 1.10391147E+01 8.91049963E-03-3.08146337E-06 4.81978458E-10-2.81094197E-14    2
-1.57622858E+04-3.06214039E+01 4.35773054E-01 3.77979036E-02-3.41142335E-05    3
 1.58434041E-08-2.93447894E-12-1.24695031E+04 2.49020597E+01                   4
mp2d3j    26_NOV.DAT       c   4h   5o   2   0G   300.000  5000.000 1392.000   31
 1.43220183E+01 1.36783854E-02-4.74486362E-06 7.29334182E-10-4.14511703E-14    2
-2.02082226E+04-4.75994987E+01 3.06570984E+00 3.96162757E-02-2.79425307E-05    3
 1.03652294E-08-1.61024935E-12-1.62172152E+04 1.30574799E+01                   4
mp2d2j    12/ 9/ 6         c   4h   5o   2   0G   300.000  5000.000 1387.000   31
 1.53321008E+01 1.33723125E-02-4.81962489E-06 7.64848539E-10-4.46143582E-14    2
-2.31016473E+04-5.50822485E+01 3.93515521E+00 4.54099414E-02-3.45825082E-05    3
 1.35630436E-08-2.18777192E-12-1.85057687E+04 1.66354308E+01                   4
mp2dmj    12/ 9/ 6         c   4h   5o   2   0G   300.000  5000.000 1391.000   31
 1.68847567E+01 1.11178481E-02-3.92616850E-06 6.21898660E-10-3.64954634E-14    2
-2.01393309E+04-6.22634480E+01 3.33358736E+00 4.52872230E-02-3.75332781E-05    3
 1.58798086E-08-2.71244352E-12-1.56896797E+04 9.61623922E+00                   4
c4h6co    28/10/08         c   5h   6o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.11891666E+02 0.11037790E-01-0.25140309E-05 0.30165734E-09-0.15384156E-13    2
 0.90935938E+03-0.48706074E+02-0.10081536E+00 0.40140461E-01-0.24838715E-04    3
 0.48132396E-08 0.68488113E-12 0.45241182E+04 0.14515800E+02                   4
mpem*o       28/10/08      c   6h  10o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.56047783E+01 0.50855745E-01-0.20196483E-04 0.35969456E-08-0.23950240E-12    2
-0.70702156E+05 0.12840813E+02 0.18461944E+01 0.72120301E-01-0.47130434E-04    3
 0.12053987E-07 0.57916963E-12-0.70975867E+05 0.27292143E+02                   4
mpe          28/10/08      c   6h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.71872058E+01 0.73931038E-01-0.31422849E-04 0.58670828E-08-0.40383132E-12    2
-0.55299137E+05 0.80026268E+02-0.14965123E+01 0.85284583E-01-0.60531340E-04    3
 0.15879717E-07 0.15271125E-11-0.59853121E+05 0.40096771E+02                   4
mpe3d     28/10/08         c   6h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.34735519E+02-0.62487628E-02 0.80235786E-05-0.21345490E-08 0.17898077E-12    2
-0.58210836E+05-0.15168999E+03-0.15860212E+00 0.53984135E-01-0.19588733E-04    3
 0.90322694E-09-0.32393589E-12-0.44887918E+05 0.42036461E+02                   4
mpe2d     28/10/08         c   6h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.50162830E+01 0.63383587E-01-0.26565776E-04 0.49120090E-08-0.33576825E-12    2
-0.42590074E+05 0.68240509E+02-0.76185930E+00 0.74054711E-01-0.51638493E-04    3
 0.13245690E-07 0.13828697E-11-0.46249637E+05 0.37509674E+02                   4
mpe4j     28/10/08         c   6h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37968841E+01 0.63357510E-01-0.25073878E-04 0.44528670E-08-0.29580144E-12    2
-0.32610480E+05 0.64331322E+02-0.17146325E+01 0.90598561E-01-0.83477484E-04    3
 0.39626798E-07-0.64336401E-11-0.36411305E+05 0.41718212E+02                   4
mpe3j     28/10/08         c   6h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.34446776E+01 0.62646471E-01-0.24691073E-04 0.43718433E-08-0.28978740E-12    2
-0.32694443E+05 0.62499634E+02-0.26745470E+01 0.97409040E-01-0.98673001E-04    3
```

```
 0.53450584E-07-0.10970639E-10-0.36318730E+05 0.45718784E+02                   4
mpe2j     28/10/08         c   6h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.39560640E+01 0.64734116E-01-0.25969746E-04 0.46567630E-08-0.31149104E-12    2
-0.35851543E+05 0.62450401E+02-0.23294196E+01 0.93879245E-01-0.87382643E-04    3
 0.42072738E-07-0.71490752E-11-0.39566266E+05 0.42012661E+02                   4
mpemj     28/10/08         c   6h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.31604998E+01 0.62802054E-01-0.24874196E-04 0.44188231E-08-0.29354852E-12    2
-0.32097898E+05 0.60604159E+02-0.24634216E+01 0.94982199E-01-0.90206187E-04    3
 0.44228038E-07-0.77081223E-11-0.35577105E+05 0.44858868E+02                   4
mpe4oo    28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.54580455E+01 0.75258240E-01-0.30980387E-04 0.56568585E-08-0.38328005E-12    2
-0.50171188E+05 0.78659241E+02-0.14282126E+01 0.10257406E+00-0.87237284E-04    3
 0.31731602E-07-0.16414779E-11-0.55373680E+05 0.43257740E+02                   4
mpe3oo    28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.54580455E+01 0.75258240E-01-0.30980387E-04 0.56568585E-08-0.38328005E-12    2
-0.49899492E+05 0.78657860E+02-0.14059025E+01 0.10241868E+00-0.86863314E-04    3
 0.31358141E-07-0.15093489E-11-0.55104320E+05 0.43162102E+02                   4
mpe2oo    28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.36244766E+02 0.92313243E-02-0.14698646E-05 0.13335104E-09-0.56050406E-14    2
-0.66296188E+05-0.15648737E+03 0.11280813E+05 0.89852117E-01-0.60774324E-04    3
 0.15737164E-07-0.79659413E-12-0.54449223E+05 0.37131283E+02                   4
mpemoo    28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.43899038E+00 0.63423052E-01-0.24624838E-04 0.43158859E-08-0.28410840E-12    2
-0.53516957E+05 0.45206081E+02-0.44114742E+01 0.10919453E+00-0.91872120E-04    3
 0.31154119E-07-0.85606928E-12-0.55731637E+05 0.57760979E+02                   4
mpe4ooh5j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.39981782E+01 0.72169669E-01-0.29273380E-04 0.52894040E-08-0.35569849E-12    2
-0.43867281E+05 0.73954262E+02-0.92962629E+00 0.10743497E+00-0.10388387E-03    3
 0.48121180E-07-0.69906754E-11-0.49079273E+05 0.42178883E+02                   4
mpe4ooh3j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.42470160E+01 0.71940593E-01-0.29040088E-04 0.52296292E-08-0.35084907E-12    2
-0.44475922E+05 0.75658478E+02-0.12878326E+01 0.11088573E+00-0.11481895E-03    3
 0.59814816E-07-0.11129855E-10-0.49805211E+05 0.43661148E+02                   4
mpe4ooh2j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.46678529E+01 0.73900633E-01-0.30265768E-04 0.55049205E-08-0.37187674E-12    2
-0.47674836E+05 0.75167313E+02-0.76199037E+00 0.10613085E+00-0.10061345E-03    3
 0.45540677E-07-0.62859375E-11-0.53072707E+05 0.39263462E+02                   4
mpe3ooh5j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.39981782E+01 0.72169669E-01-0.29273380E-04 0.52894040E-08-0.35569849E-12    2
-0.43243289E+05 0.74647339E+02-0.92962629E+00 0.10743497E+00-0.10388387E-03    3
 0.48121180E-07-0.69906754E-11-0.48455281E+05 0.42871956E+02                   4
mpe3ooh4j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.46077976E+01 0.72673760E-01-0.29440474E-04 0.53154010E-08-0.35727538E-12    2
-0.44117934E+05 0.78227715E+02-0.33100542E+00 0.10409969E+00-0.99688325E-04    3
 0.46061904E-07-0.66190109E-11-0.49625770E+05 0.40366276E+02                   4
mpe3ooh2j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.46678529E+01 0.73900633E-01-0.30265768E-04 0.55049205E-08-0.37187674E-12    2
-0.47402984E+05 0.75874832E+02-0.82069528E+00 0.10654614E+00-0.10162884E-03    3
 0.46569458E-07-0.66545372E-11-0.52794809E+05 0.40218117E+02                   4
mpe2ooh5j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.36699730E+02 0.82944753E-02-0.12089613E-05 0.10088011E-09-0.39282097E-14    2
-0.59307039E+05-0.15508862E+03 0.35926041E+00 0.96472271E-01-0.81670318E-04    3
 0.36388535E-07-0.76600115E-11-0.47775711E+05 0.37813457E+02                   4
!!!!Problems with THERGAS
mb4oo2*o     05/12/08      c   5h   7o   5   0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.57369348E+05 0.62424244E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.57369348E+05 0.62424244E+02                   4
mb4o2*o      05/12/08      c   5h   7o   4   0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.57193492E+05 0.58278008E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.57193492E+05 0.58278008E+02                   4
mp3oo2*o     05/12/08      c   4h   5o   5   0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.54276285E+05 0.57446255E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.54276285E+05 0.57446255E+02                   4
mp3ooh2*o    05/12/08      c   4h   6o   5   0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.54276285E+05 0.57446255E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.54276285E+05 0.57446255E+02                   4
mp3o2*o      05/12/08      c   4h   5o   4   0G   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.54100426E+05 0.53300152E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.54100426E+05 0.53300152E+02                   4
mpe2ooh4j 28/10/08         c   6h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14    2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04    3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                   4
```

```
mpemooh2*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpe5ooh2*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpe4ooh2*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpe3ooh2*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpecy5o3  28/10/08      c   6h  10o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpecy4o2  28/10/08      c   6h  10o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36212437E+02 0.85762544E-02-0.12488368E-05 0.10060605E-09-0.36094721E-14     2
 0.00000000E+00-0.15218810E+03 0.13485563E+01 0.90410210E-01-0.70886163E-04     3
 0.27718826E-07-0.49396719E-11 0.00000000E+00 0.33655720E+02                    4
mpe3d2j   28/10/08      c   6h   9o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     2
-0.27331656E+05 0.51522545E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.27331656E+05 0.51522545E+02                    4
peaoj2*o  28/10/08      c   5h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     2
-0.43113938E+05 0.51630795E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.43113938E+05 0.51630795E+02                    4
!!!!
c3h7coco  28/10/08      c   5h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     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
mpe2ooh3j 28/10/08      c   6h  10o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36245995E+02 0.85042007E-02-0.12753754E-05 0.11364343E-09-0.49080058E-14     2
-0.60199836E+05-0.15228159E+03 0.20117578E+00 0.98525017E-01-0.89223307E-04     3
 0.44684931E-07-0.10590404E-10-0.48875172E+05 0.38449608E+02                    4
mpe2oohmj 28/10/08      c   6h  11o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36699730E+02 0.82944753E-02-0.12089613E-05 0.10088011E-09-0.39282097E-14     2
-0.59659293E+05-0.15508862E+03 0.35926041E+00 0.96472271E-01-0.81670318E-04     3
 0.36388535E-07-0.76600115E-11-0.48127969E+05 0.37813457E+02                    4
mpemooh2j 28/10/08      c   6h  11o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.11352519E+01 0.62257163E-01-0.24038945E-04 0.41964920E-08-0.27545948E-12     2
-0.50987180E+05 0.42879471E+02-0.38052506E+01 0.11317312E+00-0.10627993E-03     3
 0.46011191E-07-0.58773229E-11-0.53424297E+05 0.54674019E+02                    4
mpe4ooh5oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.21457834E+01 0.76921917E-01-0.31299642E-04 0.56677267E-08-0.38170305E-12     2
-0.60832227E+05 0.69398148E+02 0.60747337E+00 0.11059815E+00-0.93982453E-04     3
 0.31883012E-07-0.44127538E-12-0.66071234E+05 0.39320965E+02                    4
mpe4ooh3oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.62828002E+01 0.84665060E-01-0.35432880E-04 0.65428920E-08-0.44673355E-12     2
-0.61687652E+05 0.91897118E+02 0.31488031E+00 0.11356113E+00-0.97356446E-04     3
 0.32032681E-07 0.36172088E-12-0.68626320E+05 0.39688957E+02                    4
mpe4ooh2oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25560255E+01 0.78790851E-01-0.32471551E-04 0.59317431E-08-0.40191768E-12     2
-0.62527188E+05 0.70624924E+02-0.98660153E+00 0.11737580E+00-0.10069935E-03     3
 0.33792272E-07-0.29919055E-12-0.67632164E+05 0.46000153E+02                    4
mpe3ooh5oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.20768893E+01 0.76801077E-01-0.31233601E-04 0.56531344E-08-0.38056865E-12     2
-0.60859195E+05 0.69014511E+02 0.57979995E+00 0.11079118E+00-0.94452225E-04     3
 0.32360951E-07-0.61428044E-12-0.66068273E+05 0.39437778E+02                    4
mpe3ooh4oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.62828002E+01 0.84665060E-01-0.35432880E-04 0.65428920E-08-0.44673355E-12     2
-0.61687523E+05 0.91899574E+02 0.24022518E+00 0.11407590E+00-0.98585086E-04     3
 0.33251457E-07-0.67156804E-13-0.68618289E+05 0.40007622E+02                    4
mpe3ooh2oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25560255E+01 0.78790851E-01-0.32471551E-04 0.59317431E-08-0.40191768E-12     2
-0.62255449E+05 0.71318008E+02-0.98660153E+00 0.11737580E+00-0.10069935E-03     3
 0.33792272E-07-0.29919055E-12-0.67360430E+05 0.46693237E+02                    4
mpe2ooh5oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.39949493E+02 0.10406585E-01-0.16931812E-05 0.15173407E-09-0.60581058E-14     2
-0.77409305E+05-0.16732498E+03 0.19985974E+01 0.98982193E-01-0.70369191E-04     3
 0.18947080E-07-0.75476696E-12-0.65403305E+05 0.34514969E+02                    4
mpe2ooh4oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25560255E+01 0.78790851E-01-0.32471551E-04 0.59317431E-08-0.40191768E-12     2
-0.62527281E+05 0.70626709E+02-0.91926908E+00 0.11690881E+00-0.99577344E-04     3
 0.32672236E-07 0.97212752E-13-0.67639375E+05 0.45717060E+02                    4
mpe2ooh3oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25560255E+01 0.78790851E-01-0.32471551E-04 0.59317431E-08-0.40191768E-12     2
-0.62255477E+05 0.70625595E+02-0.97153312E+00 0.11727345E+00-0.10045816E-03     3
 0.33555519E-07-0.21659149E-12-0.67362070E+05 0.45936764E+02                    4
mpe2oohmoo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.31285317E+01 0.67305021E-01-0.26287102E-04 0.46253730E-08-0.30527238E-12     2
-0.65785992E+05 0.38367813E+02-0.41773477E+01 0.12542978E+00-0.10875726E-03     3
 0.36604735E-07-0.70237425E-12-0.67967859E+05 0.61384846E+02                    4
mpemooh3oo 28/10/08     c   6h  11o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.31285317E+01 0.67305021E-01-0.26287102E-04 0.46253730E-08-0.30527238E-12     2
-0.65785969E+05 0.38367477E+02-0.41924167E+01 0.12553214E+00-0.10899846E-03     3
 0.36841495E-07-0.78497495E-12-0.67966211E+05 0.61448582E+02                    4
mpe5ooh4*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.14816866E+02 0.93233295E-01-0.41947391E-04 0.81547702E-08-0.57789526E-12     2
-0.74804227E+05 0.13624649E+03 0.23665130E+01 0.91086276E-01-0.73715717E-04     3
 0.23083672E-07 0.10138509E-11-0.84375227E+05 0.30204861E+02                    4
mpe3ooh4*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.94636898E+01 0.85080720E-01-0.37788057E-04 0.72785071E-08-0.51231984E-12     2
-0.79034633E+05 0.10536514E+03 0.12368189E+00 0.98106034E-01-0.78474113E-04     3
 0.23443167E-07 0.12161752E-11-0.85959508E+05 0.40635288E+02                    4
mpe2ooh4*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.94636898E+01 0.85080720E-01-0.37788057E-04 0.72785071E-08-0.51231984E-12     2
-0.79034625E+05 0.10536514E+03 0.12368189E+00 0.98106034E-01-0.78474113E-04     3
 0.23443167E-07 0.12161752E-11-0.85959500E+05 0.40635288E+02                    4
mpe5ooh3*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.20718899E+02 0.10428373E+00-0.48147813E-04 0.95335029E-08-0.68466137E-12     2
-0.74650203E+05 0.16903828E+03-0.99342197E+00 0.98699927E-01-0.77812452E-04     3
 0.21408301E-07 0.26679915E-11-0.85334797E+05 0.48399200E+02                    4
mpe4ooh3*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.21313492E+02 0.10673743E+00-0.49843809E-04 0.99509192E-08-0.71901854E-12     2
-0.76041891E+05 0.17047659E+03-0.28622680E+01 0.10737164E+00-0.89044479E-04     3
 0.27785118E-07 0.12438094E-11-0.86594438E+05 0.55550735E+02                    4
mpe2oohm*o 28/10/08     c   6h  10o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.86030121E+01 0.54213885E-01-0.21591151E-04 0.38507468E-08-0.25653890E-12     2
-0.83693997E+05 0.49673462E+01-0.22160225E+01 0.88129550E-01-0.63533094E-04     3
 0.17089564E-07 0.85506125E-12-0.83216195E+05 0.31451580E+02                    4
mpecy5o2  28/10/08      c   6h  10o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25901209E+02 0.11281662E+00-0.55442928E-04 0.11483817E-07-0.85270376E-12     2
-0.56865789E+05 0.17939658E+03-0.46661029E+01 0.10626137E+00-0.88768029E-04     3
 0.26810271E-07 0.19296832E-11-0.68102992E+05 0.50123058E+02                    4
mpecy2om  28/10/08      c   6h  10o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25432669E+02 0.11033727E+00-0.53600397E-04 0.11009306E-07-0.81236369E-12     2
-0.60403844E+05 0.17483783E+03-0.82139359E+01 0.11769138E+00-0.10109909E-03     3
 0.30570721E-07 0.20827656E-11-0.70936109E+05 0.65046013E+02                    4
mpe5ooh   28/10/08      c   6h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.37091682E+01 0.75263664E-01-0.31537627E-04 0.58295355E-08-0.39835865E-12     2
-0.66288539E+05 0.70556519E+02 0.34268260E+00 0.94688572E-01-0.70636474E-04     3
 0.19433285E-07 0.15060533E-11-0.70801617E+05 0.37681290E+02                    4
mpe4ooh   28/10/08      c   6h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.80382795E+01 0.83452336E-01-0.36002308E-04 0.67931634E-08-0.47110666E-12     2
-0.67084445E+05 0.93383080E+02-0.13018276E+00 0.98900124E-01-0.77004377E-04     3
 0.22564384E-07 0.12564304E-11-0.73337391E+05 0.38120178E+02                    4
mpe3ooh   28/10/08      c   6h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.80382795E+01 0.83452336E-01-0.36002308E-04 0.67931634E-08-0.47110666E-12     2
-0.66812711E+05 0.94076157E+02-0.13018276E+00 0.98900124E-01-0.77004377E-04     3
 0.22564384E-07 0.12564304E-11-0.73065656E+05 0.38813251E+02                    4
mpe2ooh   28/10/08      c   6h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36441933E+02 0.11204002E-01-0.21311846E-05 0.22173173E-09-0.10194399E-13     2
-0.84084047E+05-0.15588400E+03 0.12482158E+01 0.87317534E-01-0.53303655E-04     3
 0.93489092E-08 0.11113774E-11-0.72395719E+05 0.33375523E+02                    4
mpemooh   28/10/08      c   6h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19264876E+01 0.70952691E-01-0.29062408E-04 0.52870388E-08-0.35723090E-12     2
-0.70469109E+05 0.59564857E+02-0.31520765E+01 0.10579713E+00-0.82322666E-04     3
 0.22685752E-07 0.17894892E-11-0.73691352E+05 0.53480358E+02                    4
mpe5o     28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.36388533E+01 0.67382991E-01-0.26979840E-04 0.48300035E-08-0.32264043E-12     2
-0.48512363E+05 0.65160973E+02-0.21922421E+01 0.93184963E-01-0.74275886E-04     3
 0.25281205E-07-0.80682048E-12-0.52110574E+05 0.46318169E+02                    4
mpe4o     28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.77436996E+01 0.75025581E-01-0.31025847E-04 0.56807923E-08-0.38552099E-12     2
-0.48316000E+05 0.87505814E+02-0.26709347E+01 0.97448841E-01-0.80797487E-04     3
 0.28592616E-07-0.11288574E-11-0.53589137E+05 0.47475513E+02                    4
mpe3o     28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.77436996E+01 0.75025581E-01-0.31025847E-04 0.56807923E-08-0.38552099E-12     2
-0.48044188E+05 0.87504448E+02-0.27231989E+01 0.97813472E-01-0.81678307E-04     3
 0.29475903E-07-0.14426340E-11-0.53311840E+05 0.47694969E+02                    4
mpe2o     28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.33396900E+02 0.96389195E-02-0.15945748E-05 0.14745599E-09-0.61809002E-14     2
-0.64171109E+05-0.14435577E+03-0.14900411E+01 0.87139100E-01-0.59864175E-04     3
 0.17804945E-07-0.20076486E-11-0.52625141E+05 0.42884544E+02                    4
mpemo     28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.20461793E+01 0.63506357E-01-0.24817980E-04 0.43686836E-08-0.28841624E-12     2
-0.52634391E+05 0.55180550E+02-0.58201241E+01 0.10521155E+00-0.88149114E-04     3
 0.30694753E-07-0.12793079E-11-0.54986004E+05 0.62682774E+02                    4
mpe4oh5j  28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.64509153E+01 0.72179601E-01-0.29443616E-04 0.53406306E-08-0.36008276E-12     2
-0.51159633E+05 0.83725403E+02-0.24730258E+01 0.10435008E+00-0.10272109E-03     3
 0.50565259E-07-0.85347163E-11-0.56468172E+05 0.47684162E+02                    4
mpe3oh4j  28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.70168800E+01 0.72606832E-01-0.29565841E-04 0.53561084E-08-0.36080411E-12     2
-0.51428547E+05 0.87060501E+02-0.15614333E+01 0.98836206E-01-0.93274633E-04     3
 0.43248892E-07-0.62986474E-11-0.57048043E+05 0.43854160E+02                    4
mpe2oh3j  28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.33447048E+02 0.87749204E-02-0.13083533E-05 0.10635846E-09-0.37753076E-14     2
-0.67310094E+05-0.14112506E+03-0.12645104E+01 0.94801053E-01-0.86227788E-04     3
 0.44958881E-07-0.11239146E-10-0.56271176E+05 0.42945488E+02                    4
mpe4oh5oo 28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.44263568E+01 0.76634429E-01-0.31314707E-04 0.56862599E-08-0.38365139E-12     2
-0.68192031E+05 0.78211739E+02-0.89019644E+00 0.10720100E+00-0.92086564E-04     3
 0.33617766E-07-0.17436555E-11-0.73465070E+05 0.44633667E+02                    4
mpe3oh4oo 28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.88754826E+01 0.84945038E-01-0.35775316E-04 0.66367085E-08-0.45469436E-12     2
-0.68927672E+05 0.10244063E+03-0.12003337E+01 0.11027768E+00-0.95707786E-04     3
 0.33982371E-07-0.10040368E-11-0.76018195E+05 0.45078281E+02                    4
mpe2oh3oo 28/10/08      c   6h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.50861864E+01 0.78952782E-01-0.32743785E-04 0.60092686E-08-0.40858148E-12     2
-0.69518891E+05 0.80822258E+02-0.22754762E+01 0.11252365E+00-0.95289026E-04     3
 0.31997292E-07-0.34408560E-12-0.74776523E+05 0.50429516E+02                    4
peaoj     28/10/08      c   5h   9o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.42236457E+01 0.54956760E-01-0.21854379E-04 0.38934904E-08-0.25918281E-12     2
-0.30059875E+05 0.60040428E+02-0.10223966E+01 0.68892784E-01-0.50134327E-04     3
 0.13308625E-07 0.14019566E-11-0.33488500E+05 0.34577267E+02                    4
mhpcy3o2  02/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.95062132E+01 0.65179877E-01-0.25820455E-04 0.45889288E-08-0.30501976E-12     2
-0.67358633E+05-0.92418137E+01-0.34134014E+01 0.11659866E+00-0.82241902E-04     3
 0.20570026E-07 0.15635477E-11-0.65710250E+05 0.51001492E+02                    4
mhxcy3o2  02/10/08      c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.79610066E+01 0.58512025E-01-0.23457000E-04 0.42033239E-08-0.28098457E-12     2
-0.64045566E+05-0.30360489E+01-0.30574243E+01 0.10378165E+00-0.73005001E-04     3
 0.17036186E-07 0.21099418E-11-0.62832352E+05 0.47705605E+02                    4
c4h8co    22/10/08      c   5h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.12472316E+02 0.14873215E-01-0.36008125E-05 0.44922377E-09-0.23363364E-13     2
-0.11554275E+05-0.51140701E+02-0.60886896E+00 0.44142593E-01-0.24347322E-04     3
 0.46579518E-08 0.32262176E-12-0.73136562E+04 0.18835394E+02                    4
choch2co  17/10/08      c   3h   3o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.11130839E+02 0.64467490E-02-0.13807077E-05 0.15797674E-09-0.77903467E-14     2
-0.20768301E+05-0.26084629E+02-0.14468540E-01 0.39341085E-01-0.46270685E-04     3
 0.33409169E-07-0.10136400E-10-0.17393910E+05 0.31903505E+02                    4
mhp       16/10/08      c   8h  16o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.36996770E+01 0.86436287E-01-0.35595371E-04 0.64997310E-08-0.44031768E-12     2
-0.62059977E+05 0.65466942E+02-0.19192519E+01 0.10891849E+00-0.74223972E-04     3
 0.18207707E-07 0.20977720E-11-0.65639914E+05 0.45463112E+02                    4
hpaoj     17/10/08      c   7h  13o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.44903465E+02-0.22643388E-03-0.82144465E-10-0.30028093E-12 0.27224014E-16     2
-0.56173262E+05-0.21363193E+03 0.21232002E+01 0.72467208E-01-0.30271372E-04     3
-0.16041866E-09 0.51533127E-12-0.39712414E+05 0.24250240E+02                    4
mhp6j     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.45037034E+00 0.76280996E-01-0.29605621E-04 0.51858700E-08-0.34115907E-12     2
-0.39343109E+05 0.50481022E+02-0.20783856E+01 0.11382201E+00-0.96180534E-04     3
 0.40963553E-07-0.55111224E-11-0.42204391E+05 0.46839996E+02                    4
mhp5j     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15660280E+00 0.75677745E-01-0.29288733E-04 0.51206883E-08-0.33644918E-12     2
-0.39404102E+05 0.48973579E+02-0.31167419E+01 0.12118209E+00-0.11271040E-03     3
 0.56132532E-07-0.10528352E-10-0.42103496E+05 0.51172012E+02                    4
mhp4j     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15660280E+00 0.75677745E-01-0.29288733E-04 0.51206883E-08-0.33644918E-12     2
-0.39404102E+05 0.48973579E+02-0.31167419E+01 0.12118209E+00-0.11271040E-03     3
 0.56132532E-07-0.10528352E-10-0.42103496E+05 0.51172012E+02                    4
mhp3j     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15660280E+00 0.75677745E-01-0.29288733E-04 0.51206883E-08-0.33644918E-12     2
-0.39404102E+05 0.48973579E+02-0.31167419E+01 0.12118209E+00-0.11271040E-03     3
 0.56132532E-07-0.10528352E-10-0.42103496E+05 0.51172012E+02                    4
mhp2j     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.53451055E+00 0.77504501E-01-0.30398516E-04 0.53638338E-08-0.35466608E-12     2
-0.42610508E+05 0.48208565E+02-0.26342318E+01 0.11672358E+00-0.99212994E-04     3
 0.42563432E-07-0.59337062E-11-0.45366258E+05 0.46895977E+02                    4
mhpmj     16/10/08      c   8h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.87399170E-01 0.75898319E-01-0.29505754E-04 0.51752189E-08-0.34081952E-12     2
-0.38790441E+05 0.47305195E+02-0.28603144E+01 0.11843847E+00-0.10347623E-03     3
 0.46138059E-07-0.69908341E-11-0.41366684E+05 0.50120590E+02                    4
mhp7ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11419286E+00 0.87628745E-01-0.35674322E-04 0.64615033E-08-0.43520217E-12     2
-0.73098500E+05 0.55377182E+02 0.18697960E-01 0.11765500E+00-0.82773098E-04     3
 0.20257909E-07 0.25906473E-11-0.76599203E+05 0.42627068E+02                    4
mhp6ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.45538850E+01 0.95901296E-01-0.40094546E-04 0.73995090E-08-0.50507661E-12     2
-0.73834750E+05 0.78869560E+02-0.53271925E+00 0.12239394E+00-0.90358459E-04     3
 0.24550507E-07 0.19498981E-11-0.79126344E+05 0.43400909E+02                    4
mhp5ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.45538850E+01 0.95901296E-01-0.40094546E-04 0.73995090E-08-0.50507661E-12     2
-0.73563016E+05 0.79562645E+02-0.53271925E+00 0.12239394E+00-0.90358459E-04     3
 0.24550507E-07 0.19498981E-11-0.78854609E+05 0.44093994E+02                    4
mhp4ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.45538850E+01 0.95901296E-01-0.40094546E-04 0.73995090E-08-0.50507661E-12     2
-0.73563016E+05 0.79562645E+02-0.53271925E+00 0.12239394E+00-0.90358459E-04     3
 0.24550507E-07 0.19498981E-11-0.78854609E+05 0.44093994E+02                    4
mhp3ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.45538850E+01 0.95901296E-01-0.40094546E-04 0.73995090E-08-0.50507661E-12     2
-0.73563016E+05 0.79562645E+02-0.53271925E+00 0.12239394E+00-0.90358459E-04     3
 0.24550507E-07 0.19498981E-11-0.78854609E+05 0.44093994E+02                    4
mhp2ooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.42765728E+02 0.19146062E-01-0.42379997E-05 0.49114258E-09-0.24098260E-13     2
-0.92000195E+05-0.18638867E+03 0.10297005E+01 0.10973509E+00-0.64688254E-04     3
 0.10106132E-07 0.19479156E-11-0.78206750E+05 0.37851696E+02                    4
mhpmooh   17/10/08      c   8h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.12602324E+01 0.84081054E-01-0.33641762E-04 0.60197185E-08-0.40197839E-12     2
-0.77128367E+05 0.46632919E+02-0.37050676E+01 0.13031197E+00-0.98068725E-04     3
 0.26994989E-07 0.16841112E-11-0.79463906E+05 0.59401291E+02                    4
mhp6o     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43651800E+01 0.87805189E-01-0.35420213E-04 0.63750507E-08-0.42749915E-12     2
-0.55045203E+05 0.73521027E+02-0.31775322E+01 0.12167673E+00-0.95947333E-04     3
 0.32404458E-07-0.10931797E-11-0.59367125E+05 0.53199020E+02                    4
mhp5o     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43651800E+01 0.87805189E-01-0.35420213E-04 0.63750507E-08-0.42749915E-12     2
-0.54773570E+05 0.73519119E+02-0.31195040E+01 0.12126860E+00-0.94954572E-04     3
 0.31402884E-07-0.73555333E-12-0.59101512E+05 0.52952469E+02                    4
mhp4o     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43651800E+01 0.87805189E-01-0.35420213E-04 0.63750507E-08-0.42749915E-12     2
-0.54773570E+05 0.73519119E+02-0.31195040E+01 0.12126860E+00-0.94954572E-04     3
 0.31402884E-07-0.73555333E-12-0.59101512E+05 0.52952469E+02                    4
mhp3o     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43651800E+01 0.87805189E-01-0.35420213E-04 0.63750507E-08-0.42749915E-12     2
-0.54773570E+05 0.73519119E+02-0.31195040E+01 0.12126860E+00-0.94954572E-04     3
 0.31402884E-07-0.73555333E-12-0.59101512E+05 0.52952469E+02                    4
mhp2o     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.39830688E+02 0.17350590E-01-0.35632297E-05 0.39457068E-09-0.19012732E-13     2
-0.72122734E+05-0.17544769E+03-0.17106523E+01 0.10955987E+00-0.71229770E-04     3
 0.18519641E-07-0.11489089E-11-0.58435773E+05 0.47374706E+02                    4
mhpmo     16/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.14954312E+01 0.76115049E-01-0.29206089E-04 0.50749840E-08-0.33198186E-12     2
-0.59446094E+05 0.40232925E+02-0.61997533E+01 0.12856132E+00-0.10120413E-03     3
 0.32438695E-07-0.52215459E-12-0.60777590E+05 0.67868431E+02                    4
mhp6oh7j  17/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.30405464E+01 0.84937371E-01-0.33848708E-04 0.60405783E-08-0.40265352E-12     2
-0.57907828E+05 0.69545441E+02-0.27850869E+01 0.12721780E+00-0.11457835E-03     3
 0.51068270E-07-0.73212591E-11-0.62266824E+05 0.52585606E+02                    4
mhp5oh6j  17/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.35489192E+01 0.85264899E-01-0.33914323E-04 0.60428986E-08-0.40230086E-12     2
-0.58200309E+05 0.72558105E+02-0.18456790E+01 0.12151045E+00-0.10466678E-03     3
 0.43288075E-07-0.49213528E-11-0.62849656E+05 0.48637913E+02                    4
mhp4oh5j  17/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.33238790E+01 0.84777921E-01-0.33661719E-04 0.59924843E-08-0.39879363E-12     2
-0.58232430E+05 0.71437546E+02-0.30782616E+01 0.13021472E+00-0.12441650E-03     3
 0.61661112E-07-0.11069101E-10-0.62727945E+05 0.53792847E+02                    4
mhp3oh4j  17/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.33238790E+01 0.84777921E-01-0.33661719E-04 0.59924843E-08-0.39879363E-12     2
-0.58232430E+05 0.71437546E+02-0.30782616E+01 0.13021472E+00-0.12441650E-03     3
```

```
 0.61661112E-07-0.11069101E-10-0.62727945E+05 0.53792847E+02                   4
mhp2oh3j  17/10/08      c   8h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40012177E+02 0.16233280E-01-0.31274867E-05 0.32429689E-09-0.14632088E-13    2
-0.75309250E+05-0.17293628E+03-0.15383658E+01 0.11759770E+00-0.98511649E-04    3
 0.46603454E-07-0.10713478E-10-0.62076219E+05 0.47660694E+02                   4
mhp6oh7oo 17/10/08      c   8h  15o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.84025878E+00 0.89081071E-01-0.35547986E-04 0.63480949E-08-0.42326049E-12    2
-0.75008594E+05 0.63053825E+02-0.12238983E+01 0.13023125E+00-0.10436965E-03    3
 0.34584897E-07-0.70883474E-12-0.79261570E+05 0.49623703E+02                   4
mhp5oh6oo 17/10/08      c   8h  15o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50644636E+01 0.96912861E-01-0.39682105E-04 0.72159776E-08-0.48735495E-12    2
-0.75818883E+05 0.86071472E+02-0.17640877E+01 0.13491137E+00-0.11186337E-03    3
 0.38836980E-07-0.13531275E-11-0.81790180E+05 0.51041500E+02                   4
mhp4oh5oo 17/10/08      c   8h  15o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50644636E+01 0.96912861E-01-0.39682105E-04 0.72159776E-08-0.48735495E-12    2
-0.75547281E+05 0.86069687E+02-0.16743641E+01 0.13429426E+00-0.11039355E-03    3
 0.37381447E-07-0.84165070E-12-0.81528109E+05 0.50659447E+02                   4
mhp3oh4oo 17/10/08      c   8h  15o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50644636E+01 0.96912861E-01-0.39682105E-04 0.72159776E-08-0.48735495E-12    2
-0.75547258E+05 0.86069229E+02-0.16894325E+01 0.13439661E+00-0.11063473E-03    3
 0.37618200E-07-0.92425015E-12-0.81526461E+05 0.50723045E+02                   4
mhp2oh3oo 17/10/08      c   8h  15o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.16711205E+01 0.91659158E-01-0.37088717E-04 0.66908155E-08-0.44946346E-12    2
-0.76261234E+05 0.66636292E+02-0.29451218E+01 0.13787059E+00-0.11309951E-03    3
 0.38440167E-07-0.12317782E-11-0.80536898E+05 0.56843193E+02                   4
mhp5d     16/10/08      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.10053285E+02 0.57387095E-01-0.21622460E-04 0.37100776E-08-0.24059097E-12    2
-0.53590820E+05-0.11305885E+02 0.30272765E-01 0.94604701E-01-0.61102721E-04    3
 0.14653692E-07 0.10514907E-11-0.52010844E+05 0.36482269E+02                   4
mhp4d     16/10/08      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.47987071E+00 0.73826268E-01-0.29952320E-04 0.54122360E-08-0.36392707E-12    2
-0.49883402E+05 0.41900772E+02-0.16871644E+01 0.10188414E+00-0.70543232E-04    3
 0.18389359E-07 0.12654935E-11-0.51785164E+05 0.44374638E+02                   4
mhp3d     16/10/08      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.47323479E+02-0.83161285E-02 0.10365022E-04-0.27351756E-08 0.22849366E-12    2
-0.68704016E+05-0.21750554E+03 0.27951336E+00 0.72991610E-01-0.25736113E-04    3
-0.52404131E-09 0.18279624E-12-0.50823852E+05 0.43479877E+02                   4
mhp2d     16/10/08      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.14017532E+01 0.75720839E-01-0.30690859E-04 0.55418168E-08-0.37245380E-12    2
-0.49408793E+05 0.52949493E+02-0.12384650E+01 0.98071165E-01-0.66276392E-04    3
 0.16547338E-07 0.15974599E-11-0.52030766E+05 0.43102993E+02                   4
mhp5d4j   16/10/08      c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.11797654E+02 0.50734986E-01-0.17853743E-04 0.29197316E-08-0.18310504E-12    2
-0.38635406E+05-0.20528915E+02 0.67145181E+00 0.91630943E-01-0.64411019E-04    3
 0.21161529E-07-0.16633798E-11-0.36702484E+05 0.33000317E+02                   4
mhp5d2j   16/10/08      c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12676106E+02 0.49821511E-01-0.17484390E-04 0.28523213E-08-0.17849242E-12    2
-0.33993910E+05-0.25741585E+02-0.72595817E+00 0.10270011E+00-0.86799104E-04    3
 0.39724519E-07-0.72357858E-11-0.31732836E+05 0.38088940E+02                   4
mhp4d3j   16/10/08      c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.26202934E+01 0.66162415E-01-0.25395037E-04 0.44153068E-08-0.28903074E-12    2
-0.35032176E+05 0.30619286E+02-0.10295526E+01 0.98834649E-01-0.73715615E-04    3
 0.24789626E-07-0.14181599E-11-0.36479344E+05 0.40810425E+02                   4
mhp4d2j   16/10/08      c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.35365145E+01 0.65177143E-01-0.24980911E-04 0.43370423E-08-0.28351984E-12    2
-0.30406062E+05 0.25201942E+02-0.21942182E+01 0.10824985E+00-0.92081202E-04    3
 0.39306649E-07-0.55511147E-11-0.31533801E+05 0.44926247E+02                   4
mhpm*o    16/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.91059055E+01 0.63510537E-01-0.24580695E-04 0.42970676E-08-0.28228068E-12    2
-0.77496492E+05-0.18773575E+01 0.15970509E+01 0.95251642E-01-0.59636528E-04    3
 0.13219602E-07 0.15532207E-11-0.76770648E+05 0.32345734E+02                   4
mhpmj*o   16/10/08      c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.11507124E+02 0.55077080E-01-0.19775753E-04 0.32808218E-08-0.20784570E-12    2
-0.60307133E+05-0.12931114E+02 0.19332855E+01 0.93978591E-01-0.67095039E-04    3
 0.23211239E-07-0.21785889E-11-0.58999414E+05 0.31809969E+02                   4
mhp7oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.22484896E+01 0.80108225E-01-0.31244803E-04 0.54926783E-08-0.36229201E-12    2
-0.56145668E+05 0.41034683E+02-0.14283947E+01 0.12235777E+00-0.95466887E-04    3
 0.31872442E-07-0.11706489E-11-0.58619461E+05 0.47704025E+02                   4
mhp6oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20343897E+01 0.87967455E-01-0.35331763E-04 0.63398757E-08-0.42423687E-12    2
-0.56922477E+05 0.64413315E+02-0.17140524E+01 0.12524992E+00-0.98607867E-04    3
 0.31722127E-07-0.23713277E-12-0.61175000E+05 0.48048561E+02                   4
mhp5oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20343897E+01 0.87967455E-01-0.35331763E-04 0.63398757E-08-0.42423687E-12    2
-0.56650648E+05 0.64412216E+02-0.17644731E+01 0.12560178E+00-0.99458070E-04    3
 0.32574974E-07-0.54014340E-12-0.60897891E+05 0.48260468E+02                   4
mhp4oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
```

```
-0.20343897E+01 0.87967455E-01-0.35331763E-04 0.63398757E-08-0.42423687E-12    2
-0.56650648E+05 0.64411713E+02-0.17644731E+01 0.12560178E+00-0.99458070E-04    3
 0.32574974E-07-0.54014340E-12-0.60897891E+05 0.48259960E+02                   4
mhp3oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20343897E+01 0.87967455E-01-0.35331763E-04 0.63398757E-08-0.42423687E-12    2
-0.56650648E+05 0.64411713E+02-0.17644731E+01 0.12560178E+00-0.99458070E-04    3
 0.32574974E-07-0.54014340E-12-0.60897891E+05 0.48259960E+02                   4
mhp2oo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42801178E+02 0.16713064E-01-0.33030751E-05 0.35221870E-09-0.16376943E-13    2
-0.74294039E+05-0.18825681E+03-0.61537884E-01 0.11195343E+00-0.71375805E-04    3
 0.15691580E-07 0.33061588E-12-0.60264836E+05 0.41424469E+02                   4
mhpmoo    16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.36025627E+01 0.76675341E-01-0.29331248E-04 0.50853903E-08-0.33212173E-12    2
-0.60181449E+05 0.32364677E+02-0.48344960E+01 0.13281158E+00-0.10547060E-03    3
 0.33328352E-07-0.20865009E-12-0.61518160E+05 0.63134075E+02                   4
mhp7ooh6j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.33570666E+01 0.77063292E-01-0.29524392E-04 0.51249609E-08-0.33501947E-12    2
-0.50424672E+05 0.39256699E+02-0.13870195E+01 0.13135538E+00-0.12469225E-03    3
 0.61591443E-07-0.11236175E-10-0.53040395E+05 0.49222660E+02                   4
mhp7ooh5j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.33570666E+01 0.77063292E-01-0.29524392E-04 0.51249609E-08-0.33501947E-12    2
-0.50424672E+05 0.39256699E+02-0.13870195E+01 0.13135538E+00-0.12469225E-03    3
 0.61591443E-07-0.11236175E-10-0.53040395E+05 0.49222660E+02                   4
mhp7ooh4j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.33570666E+01 0.77063292E-01-0.29524392E-04 0.51249609E-08-0.33501947E-12    2
-0.50424672E+05 0.39256699E+02-0.13870195E+01 0.13135538E+00-0.12469225E-03    3
 0.61591443E-07-0.11236175E-10-0.53040395E+05 0.49222660E+02                   4
mhp7ooh3j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.33570666E+01 0.77063292E-01-0.29524392E-04 0.51249609E-08-0.33501947E-12    2
-0.50424672E+05 0.39256699E+02-0.13870195E+01 0.13135538E+00-0.12469225E-03    3
 0.61591443E-07-0.11236175E-10-0.53040395E+05 0.49222660E+02                   4
mhp6ooh7j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.65454525E+00 0.85054263E-01-0.33749751E-04 0.60049326E-08-0.39944447E-12    2
-0.50591836E+05 0.60139130E+02-0.13970792E+01 0.13137381E+00-0.11829490E-03    3
 0.51151574E-07-0.66634818E-11-0.54861211E+05 0.47738525E+02                   4
mhp6ooh5j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.51199102E+05 0.61875412E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55581480E+05 0.49443439E+02                   4
mhp6ooh4j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.51199102E+05 0.61875412E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55581480E+05 0.49443439E+02                   4
mhp6ooh3j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.51199102E+05 0.61875412E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55581480E+05 0.49443439E+02                   4
mhp6ooh2j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13543489E+01 0.86813785E-01-0.34742505E-04 0.62182672E-08-0.41534655E-12    2
-0.54382723E+05 0.61520092E+02-0.12227083E+01 0.13003647E+00-0.11496410E-03    3
 0.48524502E-07-0.59459239E-11-0.58855621E+05 0.44779423E+02                   4
mhp5ooh7j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.65454525E+00 0.85054263E-01-0.33749751E-04 0.60049326E-08-0.39944447E-12    2
-0.49967828E+05 0.60832214E+02-0.13970792E+01 0.13137381E+00-0.11829490E-03    3
 0.51151574E-07-0.66634818E-11-0.54237207E+05 0.48431606E+02                   4
mhp5ooh6j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.11843178E+01 0.85417978E-01-0.33835735E-04 0.60118763E-08-0.39945765E-12    2
-0.50874898E+05 0.63966362E+02-0.70127845E+00 0.12735868E+00-0.11245258E-03    3
 0.47435371E-07-0.57021172E-11-0.55418016E+05 0.45515198E+02                   4
mhp5ooh4j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp5ooh3j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp5ooh2j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13543489E+01 0.86813785E-01-0.34742505E-04 0.62182672E-08-0.41534655E-12    2
-0.54110586E+05 0.62220119E+02-0.14516542E+01 0.13162544E+00-0.11878236E-03    3
 0.52336013E-07-0.72946779E-11-0.58559398E+05 0.46447807E+02                   4
mhp4ooh7j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.65454525E+00 0.85054263E-01-0.33749751E-04 0.60049326E-08-0.39944447E-12    2
-0.49967828E+05 0.60832214E+02-0.13970792E+01 0.13137381E+00-0.11829490E-03    3
 0.51151574E-07-0.66634818E-11-0.54237207E+05 0.48431606E+02                   4
mhp4ooh6j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.11843178E+01 0.85417978E-01-0.33835735E-04 0.60118763E-08-0.39945765E-12    2
-0.50874898E+05 0.63966362E+02-0.70127845E+00 0.12735868E+00-0.11245258E-03    3
```

```
 0.47435371E-07-0.57021172E-11-0.55418016E+05 0.45515198E+02                   4
mhp4ooh5j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp4ooh3j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp4ooh2j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13543489E+01 0.86813785E-01-0.34742505E-04 0.62182672E-08-0.41534655E-12    2
-0.54110586E+05 0.62220119E+02-0.14516542E+01 0.13162544E+00-0.11878236E-03    3
 0.52336013E-07-0.72946779E-11-0.58559398E+05 0.46447807E+02                   4
mhp3ooh7j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.65454525E+00 0.85054263E-01-0.33749751E-04 0.60049326E-08-0.39944447E-12    2
-0.49967828E+05 0.60832214E+02-0.13970792E+01 0.13137381E+00-0.11829490E-03    3
 0.51151574E-07-0.66634818E-11-0.54237207E+05 0.48431606E+02                   4
mhp3ooh6j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.11843178E+01 0.85417978E-01-0.33835735E-04 0.60118763E-08-0.39945765E-12    2
-0.50874898E+05 0.63966362E+02-0.70127845E+00 0.12735868E+00-0.11245258E-03    3
 0.47435371E-07-0.57021172E-11-0.55418016E+05 0.45515198E+02                   4
mhp3ooh5j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp3ooh4j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90977675E+00 0.84844559E-01-0.33533379E-04 0.59498335E-08-0.39500125E-12    2
-0.50927359E+05 0.62568497E+02-0.18077327E+01 0.13518463E+00-0.13008632E-03    3
 0.63692241E-07-0.11099960E-10-0.55309738E+05 0.50136524E+02                   4
mhp3ooh2j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13543489E+01 0.86813785E-01-0.34742505E-04 0.62182672E-08-0.41534655E-12    2
-0.54110820E+05 0.62253193E+02-0.13020229E+01 0.13058983E+00-0.11629884E-03    3
 0.49860773E-07-0.64198794E-11-0.58575449E+05 0.45847500E+02                   4
mhp2ooh6j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42757027E+02 0.16065136E-01-0.30869480E-05 0.32587888E-09-0.15257598E-13    2
-0.68218234E+05-0.18387939E+03 0.62976909E+00 0.11629384E+00-0.90585665E-04    3
 0.36763605E-07-0.70317814E-11-0.54745211E+05 0.40254276E+02                   4
mhp2ooh5j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42923279E+02 0.15753817E-01-0.29736050E-05 0.30746097E-09-0.14076492E-13    2
-0.68241086E+05-0.18471164E+03-0.24376407E+00 0.12250903E+00-0.10436121E-03    3
 0.49179686E-07-0.11073704E-10-0.54661914E+05 0.43888504E+02                   4
mhp2ooh4j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42923279E+02 0.15753817E-01-0.29736050E-05 0.30746097E-09-0.14076492E-13    2
-0.68241086E+05-0.18471164E+03-0.24376407E+00 0.12250903E+00-0.10436121E-03    3
 0.49179686E-07-0.11073704E-10-0.54661914E+05 0.43888504E+02                   4
mhp2ooh3j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42923279E+02 0.15753817E-01-0.29736050E-05 0.30746097E-09-0.14076492E-13    2
-0.68241086E+05-0.18471164E+03-0.24376407E+00 0.12250903E+00-0.10436121E-03    3
 0.49179686E-07-0.11073704E-10-0.54661914E+05 0.43888504E+02                   4
mhp2oohmj 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43325722E+02 0.15635280E-01-0.29605965E-05 0.30719324E-09-0.14114629E-13    2
-0.67680188E+05-0.18723328E+03 0.41457910E-01 0.11955976E+00-0.94619572E-04    3
 0.38667039E-07-0.73492627E-11-0.53928102E+05 0.42715984E+02                   4
mhpmooh2j 16/10/08      c   8h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42549777E+01 0.75590439E-01-0.28794844E-04 0.49778119E-08-0.32443761E-12    2
-0.57633594E+05 0.30312660E+02-0.44862270E+01 0.13859974E+00-0.12424041E-03    3
 0.52542703E-07-0.67713981E-11-0.59183680E+05 0.61165024E+02                   4
mhp7ooh6oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556859E+05 0.56254967E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848555E+05 0.45751907E+02                   4
mhp7ooh5oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.56254753E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45751694E+02                   4
mhp7ooh4oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.56254753E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45751694E+02                   4
mhp7ooh3oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.56254753E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45751694E+02                   4
mhp6ooh7oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556859E+05 0.55562065E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848555E+05 0.45059010E+02                   4
mhp6ooh5oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
```

```
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436250E+05 0.77573730E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74372141E+05 0.46676010E+02                   4
mhp6ooh4oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436250E+05 0.77573730E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74372141E+05 0.46676010E+02                   4
mhp6ooh3oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436250E+05 0.77573730E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74372141E+05 0.46676010E+02                   4
mhp6ooh2oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.69265547E+05 0.56534103E+02-0.16101508E+01 0.14239968E+00-0.11772429E-03    3
 0.39439900E-07-0.90104573E-12-0.73397414E+05 0.52219341E+02                   4
mhp5ooh7oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.55561760E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45058712E+02                   4
mhp5ooh6oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436609E+05 0.77574966E+02-0.28049478E+00 0.13839087E+00-0.11391920E-03    3
 0.37224986E-07-0.81786798E-13-0.74394602E+05 0.45790886E+02                   4
mhp5ooh4oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164516E+05 0.78266708E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74100414E+05 0.47368992E+02                   4
mhp5ooh3oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164516E+05 0.78266708E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74100414E+05 0.47368999E+02                   4
mhp5ooh2oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.68993812E+05 0.57227188E+02-0.16101508E+01 0.14239968E+00-0.11772429E-03    3
 0.39439900E-07-0.90104573E-12-0.73125672E+05 0.52912422E+02                   4
mhp4ooh7oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.55561760E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45058712E+02                   4
mhp4ooh6oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436609E+05 0.77574966E+02-0.28049478E+00 0.13839087E+00-0.11391920E-03    3
 0.37224986E-07-0.81786798E-13-0.74394602E+05 0.45790886E+02                   4
mhp4ooh5oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164562E+05 0.77574448E+02-0.45978022E+00 0.13963561E+00-0.11691113E-03    3
 0.40212107E-07-0.11388241E-11-0.74103703E+05 0.46548607E+02                   4
mhp4ooh3oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164516E+05 0.78266708E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74100414E+05 0.47368999E+02                   4
mhp4ooh2oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.68993812E+05 0.57227188E+02-0.16101508E+01 0.14239968E+00-0.11772429E-03    3
 0.39439900E-07-0.90104573E-12-0.73125672E+05 0.52912422E+02                   4
mhp3ooh7oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.12023754E+01 0.89786783E-01-0.35755118E-04 0.63768328E-08-0.42484617E-12    2
-0.67556844E+05 0.55561760E+02 0.97844936E-01 0.13482314E+00-0.10906642E-03    3
 0.35571809E-07-0.34280017E-12-0.71848539E+05 0.45058712E+02                   4
mhp3ooh6oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68436609E+05 0.77574966E+02-0.28049478E+00 0.13839087E+00-0.11391920E-03    3
 0.37224986E-07-0.81786798E-13-0.74394602E+05 0.45790886E+02                   4
mhp3ooh5oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164516E+05 0.78266708E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74100414E+05 0.47368999E+02                   4
mhp3ooh4oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28405135E+01 0.97294338E-01-0.39711402E-04 0.72057400E-08-0.48595118E-12    2
-0.68164516E+05 0.78266708E+02-0.48991713E+00 0.13984032E+00-0.11739351E-03    3
 0.40685613E-07-0.13040226E-11-0.74100414E+05 0.47368999E+02                   4
mhp3ooh2oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.68993812E+05 0.57227188E+02-0.16101508E+01 0.14239968E+00-0.11772429E-03    3
 0.39439900E-07-0.90104573E-12-0.73125672E+05 0.52912422E+02                   4
mhp2ooh6oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.69265469E+05 0.56536545E+02-0.16547713E+01 0.14271046E+00-0.11847221E-03    3
```

```
 0.40186823E-07-0.11653045E-11-0.73392664E+05 0.52410290E+02                   4
mhp2ooh5oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.68993859E+05 0.56534821E+02-0.15800139E+01 0.14219499E+00-0.11724191E-03    3
 0.38966391E-07-0.73584698E-12-0.73128969E+05 0.52091919E+02                   4
mhp2ooh3oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.84058785E+00 0.91541268E-01-0.36843692E-04 0.66193073E-08-0.44323903E-12    2
-0.68993859E+05 0.56534821E+02-0.15800139E+01 0.14219499E+00-0.11724191E-03    3
 0.38966391E-07-0.73584698E-12-0.73128969E+05 0.52091919E+02                   4
mhp2oohmoo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.64010472E+01 0.80370449E-01-0.30903775E-04 0.53779505E-08-0.35217069E-12    2
-0.72491836E+05 0.25619390E+02-0.46983314E+01 0.14974055E+00-0.12406151E-03    3
 0.40524405E-07-0.68844913E-12-0.73744102E+05 0.67863075E+02                   4
mhpmooh2oo 16/10/08     c   8h  15o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.64010472E+01 0.80370449E-01-0.30903775E-04 0.53779505E-08-0.35217069E-12    2
-0.72491836E+05 0.24919441E+02-0.45899849E+01 0.14898127E+00-0.12222023E-03    3
 0.38671640E-07-0.28392785E-13-0.73755578E+05 0.66711365E+02                   4
mhp6ooh7*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.77852907E+01 0.10076908E+00-0.43546122E-04 0.82267002E-08-0.57104565E-12    2
-0.81372641E+05 0.10086491E+03-0.24487625E+00 0.12368339E+00-0.96452553E-04    3
 0.28848373E-07 0.10815767E-11-0.88220672E+05 0.45029434E+02                   4
mhp5ooh7*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.11276678E+02 0.10631225E+00-0.46399622E-04 0.88275955E-08-0.61586657E-12    2
-0.80636117E+05 0.12148511E+03 0.10129464E+01 0.12019048E+00-0.93938397E-04    3
 0.27980045E-07 0.14025368E-11-0.89210391E+05 0.39593792E+02                   4
mhp4ooh7*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.11276678E+02 0.10631225E+00-0.46399622E-04 0.88275955E-08-0.61586657E-12    2
-0.80636117E+05 0.12148511E+03 0.10129464E+01 0.12019048E+00-0.93938397E-04    3
 0.27980045E-07 0.14025368E-11-0.89210391E+05 0.39593792E+02                   4
mhp3ooh7*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.11276678E+02 0.10631225E+00-0.46399622E-04 0.88275955E-08-0.61586657E-12    2
-0.80636117E+05 0.12148511E+03 0.10129464E+01 0.12019048E+00-0.93938397E-04    3
 0.27980045E-07 0.14025368E-11-0.89210391E+05 0.39593792E+02                   4
mhp7ooh6*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.11160940E+02 0.10515642E+00-0.45582077E-04 0.86297067E-08-0.59991937E-12    2
-0.81585250E+05 0.12088569E+03 0.20412579E+01 0.11404983E+00-0.85817112E-04    3
 0.23846839E-07 0.21289014E-11-0.90172523E+05 0.35157658E+02                   4
mhp5ooh6*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.58659062E+01 0.97190164E-01-0.41587209E-04 0.78010611E-08-0.53869740E-12    2
-0.85806688E+05 0.90287659E+02-0.33139822E+00 0.12196150E+00-0.92694609E-04    3
 0.26296430E-07 0.16006571E-11-0.91742789E+05 0.46139027E+02                   4
mhp4ooh6*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.98487759E+01 0.10358711E+00-0.44892549E-04 0.84983043E-08-0.59076127E-12    2
-0.84878062E+05 0.11295090E+03 0.10271916E+01 0.11774561E+00-0.88370391E-04    3
 0.23534868E-07 0.26252305E-11-0.92743000E+05 0.39586609E+02                   4
mhp3ooh6*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.98057070E+01 0.10350921E+00-0.44842822E-04 0.84856397E-08-0.58965989E-12    2
-0.84895656E+05 0.11271078E+03 0.94107687E+00 0.11833239E+00-0.89753448E-04    3
 0.24889552E-07 0.21544828E-11-0.92733633E+05 0.39952747E+02                   4
mhp2ooh6*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.62621083E+01 0.97890526E-01-0.41970525E-04 0.78854230E-08-0.54521166E-12    2
-0.85653047E+05 0.92488670E+02-0.23017673E+00 0.12123771E+00-0.90892070E-04    3
 0.24424592E-07 0.22905885E-11-0.91753344E+05 0.45713150E+02                   4
mhp7ooh5*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.18791958E+02 0.11873838E+00-0.52941050E-04 0.10224837E-07-0.72110102E-12    2
-0.79286078E+05 0.16341397E+03 0.81092101E+00 0.11962986E+00-0.94048082E-04    3
 0.28130247E-07 0.17261873E-11-0.90598164E+05 0.41083832E+02                   4
mhp6ooh5*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19487206E+02 0.12128415E+00-0.54616008E-04 0.10623328E-07-0.75307908E-12    2
-0.80626312E+05 0.16544969E+03-0.84873861E+00 0.12684871E+00-0.10178179E-03    3
 0.31003601E-07 0.15468044E-11-0.91880180E+05 0.47349663E+02                   4
mhp4ooh5*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19487206E+02 0.12128415E+00-0.54616008E-04 0.10623328E-07-0.75307908E-12    2
-0.80626312E+05 0.16614278E+03-0.84873861E+00 0.12684871E+00-0.10178179E-03    3
 0.31003601E-07 0.15468044E-11-0.91880180E+05 0.48042744E+02                   4
mhp3ooh5*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19487206E+02 0.12128415E+00-0.54616008E-04 0.10623328E-07-0.75307908E-12    2
-0.80626312E+05 0.16614278E+03-0.84873861E+00 0.12684871E+00-0.10178179E-03    3
 0.31003601E-07 0.15468044E-11-0.91880180E+05 0.48042744E+02                   4
mhp2ooh5*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19720404E+02 0.12170278E+00-0.54844277E-04 0.10672952E-07-0.75685069E-12    2
-0.80538234E+05 0.16743317E+03-0.80246472E+00 0.12650914E+00-0.10091411E-03    3
 0.30079793E-07 0.18953090E-11-0.91884891E+05 0.47849236E+02                   4
mhp7ooh4*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.18791958E+02 0.11873838E+00-0.52941050E-04 0.10224837E-07-0.72110102E-12    2
-0.79286078E+05 0.16341397E+03 0.81092101E+00 0.11962986E+00-0.94048082E-04    3
 0.28130247E-07 0.17261873E-11-0.90598164E+05 0.41083832E+02                   4
mhp6ooh4*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.23177088E+02 0.12725940E+00-0.57768077E-04 0.11301515E-07-0.80456768E-12    2
-0.80097602E+05 0.18644104E+03 0.39266938E+00 0.12345147E+00-0.99450765E-04    3
 0.30269863E-07 0.18373196E-11-0.93139633E+05 0.41292950E+02                   4
mhp5ooh4*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19487206E+02 0.12128415E+00-0.54616008E-04 0.10623328E-07-0.75307908E-12    2
-0.80626312E+05 0.16614278E+03-0.84873861E+00 0.12684871E+00-0.10178179E-03    3
 0.31003601E-07 0.15468044E-11-0.91880180E+05 0.48042744E+02                   4
mhp2ooh4*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19487206E+02 0.12128415E+00-0.54616008E-04 0.10623328E-07-0.75307908E-12    2
-0.80626312E+05 0.16614278E+03-0.84873861E+00 0.12684871E+00-0.10178179E-03    3
 0.31003601E-07 0.15468044E-11-0.91880180E+05 0.48042744E+02                   4
mhp7ooh3*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17309675E+02 0.11643886E+00-0.51762752E-04 0.99767128E-08-0.70257352E-12    2
-0.81299680E+05 0.15515009E+03-0.14800292E+01 0.12278695E+00-0.92623202E-04    3
 0.24886511E-07 0.28184514E-11-0.91114875E+05 0.54034721E+02                   4
mhp6ooh3*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.82111609E+05 0.17817081E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93631523E+05 0.55226738E+02                   4
mhp5ooh3*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhp4ooh3*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhp6ooh2*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhp5ooh2*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhp4ooh2*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhp3ooh2*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhpmooh2*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21693058E+02 0.12494580E+00-0.56565546E-04 0.11044395E-07-0.78509589E-12    2
-0.81839875E+05 0.17886389E+03-0.21303926E+01 0.12821829E+00-0.10188700E-03    3
 0.30868808E-07 0.15751595E-11-0.93359789E+05 0.55919823E+02                   4
mhpcy7o5  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28226145E+02 0.13402706E+00-0.63508058E-04 0.12812285E-07-0.93292138E-12    2
-0.61827555E+05 0.19812402E+03-0.40099931E+01 0.12760606E+00-0.10273375E-03    3
 0.30938629E-07 0.19185790E-11-0.74859859E+05 0.50123631E+02                   4
mhpcy6o4  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.31617720E+02 0.14102592E+00-0.67671528E-04 0.13776609E-07-0.10098854E-11    2
-0.63065875E+05 0.21551392E+03-0.43632350E+01 0.13102101E+00-0.10727569E-03    3
 0.32338669E-07 0.22493708E-11-0.77408883E+05 0.50051422E+02                   4
mhpcy5o3  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28500517E+02 0.13598047E+00-0.64965796E-04 0.13183892E-07-0.96415660E-12    2
-0.63358375E+05 0.19774477E+03-0.56300769E+01 0.13455144E+00-0.10981589E-03    3
 0.33169243E-07 0.19634207E-11-0.76146117E+05 0.56221767E+02                   4
!!!!!
mhp2oohm*o 16/10/08     c   8h  14o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.11944091E+02 0.67142613E-01-0.26128351E-04 0.45858966E-08-0.30214056E-12    2
-0.89822125E+05-0.88528748E+01 0.16971512E+01 0.11242790E+00-0.78819146E-04    3
 0.21008969E-07 0.86109321E-12-0.88992648E+05 0.37225426E+02                   4
mhpcy7o4  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28226145E+02 0.13402706E+00-0.63508058E-04 0.12812285E-07-0.93292138E-12    2
-0.61827555E+05 0.19812402E+03-0.40099931E+01 0.12760606E+00-0.10273375E-03    3
 0.30938629E-07 0.19185790E-11-0.74859859E+05 0.50123631E+02                   4
mhpcy7o3  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28226145E+02 0.13402706E+00-0.63508058E-04 0.12812285E-07-0.93292138E-12    2
-0.64544953E+05 0.19540662E+03-0.40099931E+01 0.12760606E+00-0.10273375E-03    3
 0.30938629E-07 0.19185790E-11-0.77577258E+05 0.47406223E+02                   4
mhpcy6o3  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.31617720E+02 0.14102592E+00-0.67671528E-04 0.13776609E-07-0.10098854E-11    2
-0.63065875E+05 0.21551392E+03-0.43632350E+01 0.13102101E+00-0.10727569E-03    3
 0.32338669E-07 0.22493708E-11-0.77408883E+05 0.50051422E+02                   4
mhpcy6o2  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28500517E+02 0.13598047E+00-0.64965796E-04 0.13183892E-07-0.96415660E-12    2
-0.66347508E+05 0.19502736E+03-0.56300769E+01 0.13455144E+00-0.10981589E-03    3
 0.33169243E-07 0.19634207E-11-0.79135258E+05 0.53504360E+02                   4
mhpcy5o2  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28500517E+02 0.13598047E+00-0.64965796E-04 0.13183892E-07-0.96415660E-12    2
-0.63358375E+05 0.19774477E+03-0.56300769E+01 0.13455144E+00-0.10981589E-03    3
 0.33169243E-07 0.19634207E-11-0.76146117E+05 0.56221767E+02                   4
mhpcy2om  17/10/08      c   8h  14o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.23187420E+02 0.12404221E+00-0.57696914E-04 0.11485643E-07-0.82813048E-12    2
-0.66512398E+05 0.16766948E+03-0.86902590E+01 0.14171596E+00-0.11578492E-03    3
 0.33951309E-07 0.22580204E-11-0.76717406E+05 0.70636810E+02                   4
mo8ooh4j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.47282667E+01 0.84058024E-01-0.32081054E-04 0.55551030E-08-0.36258217E-12    2
-0.53673887E+05 0.33315094E+02-0.13716327E+01 0.14158647E+00-0.12769102E-03    3
 0.58871183E-07-0.95593490E-11-0.55957887E+05 0.50255413E+02                   4
mo7ooh3j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo6ooh2j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57466027E+05 0.54739029E+02-0.12524765E+01 0.14059180E+00-0.11877350E-03    3
 0.46650477E-07-0.45828983E-11-0.61496691E+05 0.46694614E+02                   4
mo4ooh8j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53319406E+05 0.53403824E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57125656E+05 0.50619186E+02                   4
mo3ooh7j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371615E-12    2
-0.54193930E+05 0.57691078E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47980724E+02                   4
mo2ooh6j  03/10/08      c   9h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013398E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo8ooh4oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974156E+05 0.47893257E+02-0.46950351E-02 0.14590034E+00-0.11417698E-03    3
 0.35047417E-07 0.52402819E-12-0.74753797E+05 0.47279560E+02                   4
mo7ooh3oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512344E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089100E+02                   4
mo6ooh2oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.96630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo4ooh8oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974156E+05 0.47893150E+02-0.46950351E-02 0.14590034E+00-0.11417698E-03    3
 0.35047417E-07 0.52402819E-12-0.74753797E+05 0.47279453E+02                   4
mo3ooh7oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512344E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089100E+02                   4
mo2ooh6oo 03/10/08      c   9h  17o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.96630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo4ooh8*o 03/10/08      c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.94011478E+01 0.11224698E+00-0.48424477E-04 0.90777830E-08-0.62826849E-12    2
-0.84055234E+05 0.11281560E+03 0.88079315E+00 0.13146219E+00-0.99486249E-04    3
 0.27860226E-07 0.21377080E-11-0.92112328E+05 0.41247841E+02                   4
mo3ooh7*o 03/10/08      c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.78532286E+01 0.10932972E+00-0.46648998E-04 0.87330818E-08-0.60219473E-12    2
-0.88345797E+05 0.10430333E+03 0.68202120E+00 0.13049370E+00-0.97469383E-04    3
 0.26971458E-07 0.20957515E-11-0.95622094E+05 0.42836174E+02                   4
mo2ooh6*o 03/10/08      c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo8ooh4*o 03/10/08      c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12    2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04    3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo7ooh3*o 03/10/08      c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.20145365E+02 0.13134094E+00-0.58573514E-04 0.11315033E-07-0.79813369E-12    2
-0.85383133E+05 0.17277052E+03-0.22760024E+01 0.13957317E+00-0.10760363E-03    3
 0.30881012E-07 0.22776512E-11-0.96531898E+05 0.58325226E+02                   4
mocy8o4   03/10/08      c   9h  16o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.26874338E+02 0.14054599E+00-0.65425294E-04 0.10332252E-07-0.94011094E-12    2
-0.67700734E+05 0.19051373E+03-0.43543243E+01 0.14035048E+00-0.11182443E-03    3
 0.34362870E-07 0.13960118E-11-0.80456492E+05 0.50651840E+02                   4
mocy7o3   03/10/08      c   9h  16o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.30690443E+02 0.14823408E+00-0.69917194E-04 0.14058481E-07-0.10211486E-11    2
-0.68764602E+05 0.21029102E+03-0.46177239E+01 0.14311773E+00-0.11474347E-03    3
 0.34071995E-07 0.23507205E-11-0.83014805E+05 0.50202412E+02                   4
mocy6o2   03/10/08      c   9h  16o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.27125036E+02 0.14239866E+00-0.66785855E-04 0.13374052E-07-0.96849579E-12    2
-0.69230195E+05 0.19003258E+03-0.60104256E+01 0.14756574E+00-0.11960818E-03    3
 0.37348975E-07 0.11541126E-11-0.81739156E+05 0.56899799E+02                   4
c6ald5oxo 03/10/08      c   6h  10o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    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
mhx6j3*o  03/10/08      c   7h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.18370543E+02 0.97157516E-01-0.42447478E-04 0.80809039E-08-0.56400164E-12    2
-0.43376281E+05 0.15189270E+03-0.41984034E+01 0.11212639E+00-0.10742954E-03    3
 0.50604378E-07-0.74213387E-11-0.52631570E+05 0.59057026E+02                   4
choc3h6cho 02/10/08     c   5h  8o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    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
choc3h6co 02/10/08      c   5h  7o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    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
mhx6ooh2j 02/10/08      c   7h  13o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.11440601E+01 0.72690576E-01-0.28492961E-04 0.50260365E-08-0.33229037E-12    2
-0.50198664E+05 0.45651382E+02-0.42313668E+00 0.11320300E+00-0.99815567E-04    3
 0.42303270E-07-0.53029148E-11-0.53443660E+05 0.40442986E+02                   4
mhx2ooh6j 02/10/08      c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.40051258E+02 0.11890890E-01-0.20436926E-05 0.19805756E-09-0.87725220E-14    2
-0.63331297E+05-0.17137166E+03 0.19829021E+00 0.10804187E+00-0.88232766E-04    3
 0.37637168E-07-0.75496354E-11-0.50675734E+05 0.40271969E+02                   4
mhxcy6o2  02/10/08      c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.45942173E+02 0.16605910E-02-0.51828888E-07-0.44305427E-11 0.52850277E-15    2
-0.90684531E+05-0.22239754E+03-0.49567735E+00 0.93409814E-01-0.54218570E-04    3
 0.82668894E-08 0.58180988E-12-0.74249789E+05 0.30815498E+02                   4
mhx6ooh2oo 02/10/08     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.43179142E+02 0.14230911E-01-0.26589285E-05 0.27396482E-09-0.12579246E-13    2
-0.81387641E+05-0.18362930E+03 0.17108448E+01 0.11142286E+00-0.79005244E-04    3
 0.22249349E-07-0.13664260E-11-0.68289625E+05 0.36818092E+02                   4
mhx2ooh6oo 02/10/08     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.43179142E+02 0.14230911E-01-0.26589285E-05 0.27396482E-09-0.12579246E-13    2
-0.81387641E+05-0.18362967E+03 0.17108448E+01 0.11142286E+00-0.79005244E-04    3
 0.22249349E-07-0.13664260E-11-0.68289625E+05 0.36817722E+02                   4
mhx2ooh6*o 02/10/08     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.93238049E+01 0.94250128E-01-0.41391857E-04 0.79094020E-08-0.55353974E-12    2
-0.78086766E+05 0.10765195E+03 0.15029451E+00 0.11062257E+00-0.86699038E-04    3
 0.24865454E-07 0.17648323E-11-0.85347383E+05 0.42256737E+02                   4
choc2h4co 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
-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
c5h11coco   29/05/06    c   7h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
ch2cooh   11/ 8/ 6      c   2h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000     1
 8.86469894E+00 7.91565144E-03-2.73714924E-06 4.26587776E-10-2.47690229E-14    2
-3.02226060E+04-1.82550646E+01 1.69124618E+00 2.53013086E-02-1.91526770E-05    3
 7.60687742E-09-1.24622437E-12-2.77850622E+04 2.00638791E+01                   4
c2h3co2   11/22/ 6      c   3h   3o   2    0G   300.000  5000.000 1397.000     1
 1.10391147E+01 8.91049963E-03-3.08146337E-06 4.81978458E-10-2.81094197E-14    2
-1.57622858E+04-3.06214039E+01 4.35773054E-01 3.77979036E-02-3.41142335E-05    3
 1.58434041E-08-2.93447894E-12-1.24695031E+04 2.49020597E+01                   4
mp2d2j    12/ 9/ 6      c   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1387.000     1
 1.53321008E+01 1.33723125E-02-4.81964489E-06 7.64848539E-10-4.46143582E-14    2
-2.31016473E+04-5.50822485E+01 1.93515521E+00 4.54099414E-02-3.45825082E-05    3
 1.35630436E-08-2.18777192E-12-1.85057687E+04 1.66354308E+01                   4
mp2dmj    12/ 9/ 6      c   4h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1391.000     1
 1.68847567E+01 1.11178481E-02-3.92616850E-06 6.21898660E-10-3.64954634E-14    2
-2.01393309E+04-6.22634480E+01 3.33358736E+00 4.52872230E-02-3.75332781E-05    3
 1.58798086E-08-2.71244352E-12-1.56896797E+04 9.61623922E+00                   4
memj      12/ 9/ 6      c   3h   5o   2    0G   300.000  5000.000 1392.000     1
 1.38587401E+01 1.13235183E-02-3.91663105E-06 6.00684427E-10-3.40584427E-14    2
-3.08875399E+04-4.66699226E+01 3.87187920E+00 3.46323614E-02-2.50705349E-05    3
 9.51853192E-09-1.50518911E-12-2.73821006E+04 7.03163958E+00                   4
ba4j      12/ 9/ 6      c   4h   7o   2    0G   300.000  5000.000 1390.000     1
 1.53128920E+01 1.64832757E-02-5.59903777E-06 8.65487464E-10-5.00455361E-14    2
-3.95158614E+04-5.07782036E+01 1.80576858E+00 4.90137730E-02-3.61169100E-05    3
 1.41367909E-08-2.29713521E-12-3.49007549E+04 2.14545929E+01                   4
prcoco                  c   5h   7o   2    0G   200.000  6000.00  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
c5ald2oxo               c   5h   8o   2    0G   200.000  6000.00  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
c4ald2oxo               c   4h   6o   2    0G   200.000  6000.00  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
mhx4d2j                 c   7h  11o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.11144978E+02 0.43091785E-01-0.15060871E-04 0.24498139E-08-0.15299097E-12    2
-0.30680479E+05-0.19614449E+02-0.28239161E+00 0.89266732E-01-0.76075201E-04    3
 0.34704946E-07-0.61637227E-11-0.28864109E+05 0.34406216E+02                   4
mo4d2j                  c   9h  15o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.54089098E+01 0.71324833E-01-0.27111597E-04 0.46803352E-08-0.30478395E-12    2
-0.33853582E+05 0.17171234E+02-0.24139750E+01 0.12014805E+00-0.99178869E-04    3
 0.40783728E-07-0.54002232E-11-0.34426641E+05 0.47659622E+02                   4
mo5d2j                  c   9h  15o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.54089098E+01 0.71324833E-01-0.27111597E-04 0.46803352E-08-0.30478395E-12    2
-0.33853582E+05 0.17171234E+02-0.24139750E+01 0.12014805E+00-0.99178869E-04    3
 0.40783728E-07-0.54002232E-11-0.34426641E+05 0.47659622E+02                   4
mo6d2j                  c   9h  15o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.14513463E+02 0.56059774E-01-0.19689956E-04 0.32160004E-08-0.20152605E-12    2
-0.37431637E+05-0.33590263E+02-0.83540511E+00 0.11384048E+00-0.92095906E-04    3
 0.39424290E-07-0.64630328E-11-0.34637574E+05 0.40354176E+02                   4
mo7d2j                  c   9h  15o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.26999075E+01 0.76163597E-01-0.29564602E-04 0.51785514E-08-0.34063429E-12    2
-0.31296928E+05 0.32903740E+02-0.24371562E+01 0.12191224E+00-0.10267914E-03    3
 0.43071825E-07-0.58010541E-11-0.33043910E+05 0.47931957E+02                   4
mhp6d2j                 c   8h  13o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
 0.83345908E+00 0.70033707E-01-0.27473852E-04 0.48496887E-08-0.32082456E-12    2
-0.27853746E+05 0.40892601E+02-0.24475813E+01 0.11160511E+00-0.99396901E-04    3
 0.45404605E-07-0.73031338E-11-0.30126326E+05 0.46174625E+02                   4
mhx5d2j                 c   7h  11o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
-0.74945617E+00 0.63418970E-01-0.25127820E-04 0.44659241E-08-0.29682070E-12    2
-0.24524672E+05 0.47295761E+02-0.19776601E+01 0.97992428E-01-0.88248453E-04    3
 0.39964061E-07-0.60820017E-11-0.27260484E+05 0.42380337E+02                   4
mpe4d2j                 c   6h   9o   2    0G   200.000  6000.00  1000.00      1
-0.23628917E+01 0.56873426E-01-0.22837157E-04 0.40977000E-08-0.27422205E-12    2
-0.21184654E+05 0.53866631E+02-0.16610881E+01 0.85441098E-01-0.79653582E-04    3
 0.37080454E-07-0.57693589E-11-0.24378146E+05 0.39238819E+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
ch3ch2o          sep09  c   2h   5o   1    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.82551069E+01 0.91911871E-02-0.22665522E-05 0.28864391E-09-0.15333649E-13    2
-0.58024766E+04-0.19279732E+02-0.58062494E+00 0.31632472E-01-0.23934688E-04    3
 0.10487335E-07-0.21510211E-11-0.30872104E+04 0.27282484E+02                   4
ch3choh          sep09  c   2h   5o   1    0G   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.81326885E+01 0.86081643E-02-0.19969605E-05 0.24286678E-09-0.12495632E-13    2
-0.10266092E+05-0.15292793E+02 0.17558477E+01 0.24310771E-01-0.16843838E-04    3
 0.71160797E-08-0.13366874E-11-0.82450596E+04 0.18517672E+02                   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
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
c5h2               20587c   5h   2         G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.01132917e+03 0.07424057e-01-0.02628189e-04 0.04082541e-08-0.02301333e-12    2
 0.07878706e+06-0.03617117e+03 0.03062322e+02 0.02709998e+00-0.01009170e-03    3
-0.01272745e-06 0.09167219e-10 0.08114969e+06 0.07071078e+02                   4
c5h3               20387c   5h   3         G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.10787622e+02 0.09539619e-01-0.03206744e-04 0.04733323e-08-0.02512135e-12    2
 0.06392904e+06-0.03005444e+03 0.04328720e+02 0.02352480e+00-0.05856723e-04    3
-0.12154494e-07 0.07726478e-10 0.06588531e+06 0.04173258e+02                   4
ch3chcch                c   4h   5    0    0G   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.97551451E+01 0.10893099E-01-0.28639304E-05 0.38014411E-09-0.20654993E-13    2
 0.31374559E+05-0.23363979E+02 0.21167235E+01 0.31515051E-01-0.24003739E-04    3
 0.10599292E-07-0.20698213E-11 0.33603656E+05 0.16454231E+02                   4
ch3ccch2           020909c  4h   5         G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.93718195E+01 0.10943430E-01-0.28461995E-05 0.37583670E-09-0.20403943E-13    2
 0.43908766E+05-0.22122715E+02 0.20674040E+01 0.29324345E-01-0.21672709E-04    3
 0.10863495E-07-0.27395547E-11 0.46220145E+05 0.16550642E+02                   4
h2cccch2           020909c  4h   4         G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 0.86111174E+01 0.11793852E-01-0.41839580E-05 0.68837203E-09-0.43363591E-13    2
 0.37081539E+05-0.21326038E+02 0.22197702E+01 0.27351227E-01-0.15688180E-04    3
 0.22363480E-08 0.73751541E-12 0.38985766E+05 0.12307355E+02                   4
c5h915                  c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14239400E+02 0.18068190E-01-0.49482890E-05 0.67665280E-09-0.37522090E-13    2
 0.15201320E+05-0.47084900E+02-0.13380710E+01 0.62585920E-01-0.56987660E-04    3
 0.31840700E-07-0.80973840E-11 0.19687340E+05 0.33649340E+02                   4
c6h1013                 c   6h  10o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 9.58751E+00    3.28103E-02   -1.17669E-05    1.94038E-09   -1.21865E-13     2
 5.58295E+02   -2.29652E+01    1.49551E+00    5.15872E-02   -1.76623E-05     3
-9.90653E-09    6.91960E-12    2.78042E+03    1.92918E+01                    4
c6h1012                 c   6h  10o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 1.10957E+01    3.03612E-02   -1.05949E-05    1.71119E-09   -1.05783E-13     2
 7.73633E+03   -2.99726E+01    1.78776E+00    5.08436E-02   -2.08752E-05     3
-2.65723E-09    3.34336E-12    1.06321E+04    1.95759E+01                    4
c6h1112                 c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15903220E+02 0.23659610E-01-0.67095560E-05 0.94231160E-09-0.53289920E-13    2
 0.15837710E+05-0.54096690E+02 0.14245270E+00 0.61529150E-01-0.39403020E-04    3
 0.13625820E-07-0.21393720E-11 0.20807860E+05 0.29545670E+02                   4
c6h1116                 c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.17076340E+02 0.22671950E-01-0.63895440E-05 0.89470780E-09-0.50568520E-13    2
 0.11361890E+05-0.60549350E+02-0.16492270E+01 0.75181060E-01-0.65979160E-04    3
 0.35487100E-07-0.88287520E-11 0.16803640E+05 0.36751710E+02                   4
c6h1115                 c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.16511810E+02 0.23103710E-01-0.65196350E-05 0.91279680E-09-0.51533620E-13    2
 0.11020680E+05-0.57226020E+02-0.65185990E+00 0.69069390E-01-0.55091450E-04    3
 0.26728390E-07-0.60813550E-11 0.16144180E+05 0.32558910E+02                   4
c6h1113                 c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.15939530E+02 0.24454600E-01-0.71328250E-05 0.10237720E-08-0.58843450E-13    2
 0.27317560E+04-0.56236800E+02-0.18343630E+00 0.62924820E-01-0.39494870E-04    3
 0.12901540E-07-0.19206490E-11 0.78098810E+04 0.29353710E+02                   4
c6h1114                 c   6h  110   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 1.32786E+01    2.79515E-02   -8.47472E-06    1.23752E-09   -7.12640E-14     2
 1.22232E+04   -3.88114E+01   -1.06617E+00    7.16134E-02   -5.85771E-05     3
 2.71262E-08   -5.15786E-12    1.59829E+04    3.43102E+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
c5h813                  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
c5h924                  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
c2h3o                   c   2h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.68198430E+01 0.69081690E-02-0.17474870E-05 0.22633760E-09-0.12139680E-13    2
 0.11202610E+05-0.11666060E+02-0.98890220E+00 0.31173100E-01-0.32435250E-04    3
 0.19570140E-07-0.51187710E-11 0.13293520E+05 0.28182510E+02 0.62295550E+01    4
c5h913                  c   5h   90   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.11281250E+02 0.24692410E-01-0.91339800E-05 0.16293790E-08-0.11083700E-12    2
 0.71404790E+04-0.32842090E+02-0.62834060E+00 0.52674990E-01-0.25201420E-04    3
-0.46990540E-08 0.62120370E-11 0.10732130E+05 0.30006350E+02                   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
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
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
oc4h6                   c   4h   6o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.22456690E+02-0.31382880E-02 0.37449240E-05-0.97529660E-09 0.80986270E-13    2
-0.18993180E+05-0.93100920E+02 0.28180410E+01 0.31063560E-01-0.10727810E-04    3
-0.13454390E-08 0.47401960E-12-0.11617290E+05 0.15617700E+02                   4
c4h5o                   c   4h   5o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.98741220E+01 0.16024210E-01-0.50865670E-05 0.77408690E-09-0.46231360E-13    2
 0.88303990E+04-0.10636820E+02 0.88201550E+00 0.40041880E-01-0.24724830E-04    3
 0.41598020E-08 0.11702480E-11 0.11270030E+05 0.35847220E+02                   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
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
c4h612                  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
c3h3o                   c   3h   3o   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
c4h711                  c   4h   7o   0    G  0300.00   5000.00  1000.00      1
 8.77489E+00    1.70033E-02   -4.88644E-06    6.86060E-10   -3.84180E-14     2
 2.54887E+04   -1.92472E+01    8.44223E-02    4.05058E-02   -2.68856E-05     3
 8.32621E-09   -4.83711E-13    2.79400E+04    2.58461E+01                    4
c4h73                   c   4h   70   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.11184356E+02 0.14457868E-01-0.44852630E-05 0.73693834E-09-0.48752824E-13    2
 0.17987671E+05-0.32095703E+02 0.21544552E+01 0.21568453E-01 0.29077822E-04    3
-0.54719830E-07 0.23710092E-10 0.21387008E+05 0.18934394E+02 0.23147967E+05    4
sc4h9                   c   4h   90   00   0G   300.00   5000.000  1000.00     1
 0.94282923E+01 0.21911845E-01-0.72831863E-05 0.10622090E-08-0.55580591E-13    2
 0.36300923E+04-0.22419800E+02 0.69567555E+00 0.33100396E-01 0.63189173E-05    3
-0.27052078E-07 0.12000780E-10 0.68517148E+04 0.26270721E+02                   4
c3h4oh                  c   3h   5o   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 0.91500000E+00 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.74540000E+03 0.91500000E+00                   4
c3h4o                   c   3h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.14131820E+02 0.21444260E-02-0.27709840E-06 0.19891710E-10-0.63146380E-15    2
-0.33371300E+04-0.53232480E+02-0.21515840E+00 0.27979760E-01-0.12622850E-04    3
 0.52835150E-09 0.34674280E-12 0.20108400E+04 0.25954130E+02                   4
c3h4o2h                 c   3h   5o   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
c3h6o                   c   3h   6o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.87072600E+01 0.15987650E-01-0.53762800E-05 0.79422000E-09-0.42210000E-13    2
-0.69370000E+04-0.22579000E+02 0.48379000E+00 0.28574700E-01 0.28022400E-05    3
```

```
-0.22371520E-07 0.10581540E-10-0.40666000E+04 0.22616000E+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
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
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
acrol                   c   3h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.68803410E+01 0.13655080E-01-0.53734420E-05 0.98568390E-09-0.68047410E-13    2
-0.12312170E+05-0.87491310E+01 0.60178160E+01-0.38976370E-02 0.54682330E-04    3
-0.65085770E-07 0.24362900E-10-0.11060200E+05 0.64990360E+00                   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-09-0.27935380E-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
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 3.89946532E+00 9.70107503E-03-3.11930933E-07    3
-5.53773250E-09 2.46573248E-12 8.70119043E+03 4.49187470E+00                   4
pent1o2                 c   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.17646378E+02 0.25282910E-01-0.73533374E-05 0.10517021E-08-0.60221095E-13    2
-0.17934422E+05-0.60600075E+02 0.17027425E-01 0.71035668E-01-0.47930876E-04    3
 0.14536414E-07-0.10984047E-11-0.12819146E+05 0.31479816E+02                   4
pent2o2                 c   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.36857990E+02-0.17731173E-03 0.23184521E-07-0.56912691E-11 0.47317283E-15    2
-0.28888820E+05-0.17130139E+03 0.16895518E+01 0.63084193E-01-0.33561482E-04    3
 0.72348039E-08-0.17486220E-11-0.15616550E+05 0.23188177E+02                   4
pent1o2h3j              c   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18154026E+02 0.23554642E-01-0.65458898E-05 0.90545921E-09-0.50648911E-13    2
-0.12018173E+05-0.59157494E+02-0.20940578E-01 0.80594547E-01-0.78530684E-04    3
 0.45650904E-07-0.11665004E-10-0.72317173E+04 0.33331665E+02                   4
pent2o2h4j              c   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.36579456E+02-0.38608228E-03 0.91255687E-08-0.30491445E-11 0.24947942E-15    2
-0.22729131E+05-0.16564307E+03 0.27580445E+01 0.64803950E-01-0.46467019E-04    3
 0.22007079E-07-0.68796739E-11-0.10137231E+05 0.20418283E+02                   4
pent1o2h3o2             c   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40808033E+02 0.55447291E-03 0.13684168E-07-0.53191392E-11 0.45151213E-15    2
-0.39820434E+05-0.18348886E+03 0.35764275E+01 0.72196692E-01-0.43091382E-04    3
 0.10360081E-07-0.16708790E-11-0.26298668E+05 0.20570972E+02                   4
pent2o2h4o2             c   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.10834413E+02 0.44198658E-01-0.15679594E-04 0.25792866E-08-0.16244130E-12    2
-0.29646205E+05-0.13899681E+02 0.84606773E+00 0.89028671E-01-0.70305832E-04    3
 0.22856772E-07-0.68496586E-12-0.28828988E+05 0.30951935E+02                   4
pent3o2h1*o             c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
pent4o2h2*o             c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
hept1o2                 c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23412485E+02 0.34341998E-01-0.10155525E-04 0.14678821E-08-0.84550422E-13    2
-0.25654047E+05-0.88062393E+02-0.26838267E+00 0.93909197E-01-0.60394810E-04    3
 0.16360488E-07-0.63760195E-12-0.18622889E+05 0.36245754E+02                   4
hept2o2                 c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
hept3o2                 c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
hept4o2                 c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
hept1o2h3j              c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
```

```
 0.23908697E+02 0.32625120E-01-0.93509125E-05 0.13230008E-08-0.75177772E-13    2
-0.19731439E+05-0.86550362E+02-0.28376153E+00 0.10329776E+00-0.90554306E-04    3
 0.47008129E-07-0.11030720E-10-0.13037676E+05 0.38004791E+02                   4
hept2o2h4j             c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
hept3o2h1j             c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
hept3o2h5j             c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
hept4o2h2j             c   7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
hept1o2h3o2            c   7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330754E+05-0.22292564E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089293E+05 0.25852079E+02                   4
hept2o2h4o2            c   7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.13927637E+02 0.57605498E-01-0.20497164E-04 0.33773853E-08-0.21286956E-12    2
-0.36015492E+05-0.26364342E+02 0.41297254E+00 0.11271177E+00-0.84055260E-04    3
 0.25175671E-07-0.87265732E-13-0.34342625E+05 0.36366920E+02                   4
hept3o2h1o2            c   7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.48758560E+02 0.54455325E-02-0.43166435E-06 0.10703780E-10 0.62513583E-15    2
-0.48330758E+05-0.22361890E+03 0.31689079E+01 0.95913351E-01-0.57568777E-04    3
 0.14180130E-07-0.19112424E-11-0.32089295E+05 0.25158834E+02                   4
hept3o2h5o2            c   7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.13927637E+02 0.57605498E-01-0.20497164E-04 0.33773853E-08-0.21286956E-12    2
-0.36015492E+05-0.26364342E+02 0.41297254E+00 0.11271177E+00-0.84055260E-04    3
 0.25175671E-07-0.87265732E-13-0.34342625E+05 0.36366920E+02                   4
hept4o2h2o2            c   7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.13927637E+02 0.57605498E-01-0.20497164E-04 0.33773853E-08-0.21286956E-12    2
-0.36015492E+05-0.26364342E+02 0.41297254E+00 0.11271177E+00-0.84055260E-04    3
 0.25175671E-07-0.87265732E-13-0.34342625E+05 0.36366920E+02                   4
hept3o2h1*o            c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66761913E+01 0.63579872E-01-0.24786334E-04 0.43552073E-08-0.28713428E-12    2
-0.48527828E+05 0.11411880E+02 0.18196348E+01 0.93742207E-01-0.62271742E-04    3
 0.14180289E-07 0.19986862E-11-0.49170738E+05 0.29693682E+02                   4
hept4o2h2*o            c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.52835156E+05 0.21772919E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52673648E+05 0.30867123E+02                   4
hept1o2h3*o            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
hept5o2h3*o            c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.52835156E+05 0.21772919E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52673648E+05 0.30867123E+02                   4
hept2o2h4*o            c   7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.82186480E+01 0.60793452E-01-0.23357892E-04 0.40622234E-08-0.26587407E-12    2
-0.52835156E+05 0.21772919E+01 0.15546507E+01 0.93248300E-01-0.61428938E-04    3
 0.14494288E-07 0.15211230E-11-0.52673648E+05 0.30867123E+02                   4
c7h15-2                c   7h  15o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.21515768E+02 0.29486412E-01-0.82919769E-05 0.11578348E-08-0.65235632E-13    2
-0.92242363E+04-0.83030952E+02-0.82048351E+00 0.85861146E-01-0.64021231E-04    3
 0.29491575E-07-0.66910357E-11-0.22572083E+04 0.34964172E+02                   4
c7h15-3                c   7h  15o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.21767111E+02 0.29007252E-01-0.80751834E-05 0.11174337E-08-0.62470869E-13    2
-0.92772617E+04-0.84327080E+02-0.18707907E+01 0.93293086E-01-0.80697057E-04    3
 0.44781842E-07-0.11743607E-10-0.21548594E+04 0.39348347E+02                   4
c7h15-4                c   7h  15o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.21767111E+02 0.29007252E-01-0.80751834E-05 0.11174337E-08-0.62470869E-13    2
-0.92772617E+04-0.85020157E+02-0.18707907E+01 0.93293086E-01-0.80697057E-04    3
 0.44781842E-07-0.11743607E-10-0.21548594E+04 0.38655270E+02                   4
c6h13-1    1/14/95 thermc  6h  13    0    0g   300.000  5000.000 1397.00      51
 1.85219223e+01 2.82755903e-02-9.62785872e-06 1.49000931e-09-8.62480621e-14    2
-5.00124444e+03-7.06345855e+01-7.62937152e-01 7.18105209e-02-4.71329725e-05    3
 1.62249790e-08-2.32087543e-12 1.89021556e+03 3.35439856e+01                   4
c6h13-2                c   6h  13o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.18444628E+02 0.25260014E-01-0.70089350E-05 0.96764086E-09-0.54014549E-13    2
-0.52953047E+04-0.68292130E+02-0.62879652E+00 0.73959723E-01-0.56466673E-04    3
```

```
 0.27132254E-07-0.63718666E-11 0.63659387E+03 0.32349510E+02                   4
c6h13-3                c   6h  13o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.18621922E+02 0.24911519E-01-0.68681725E-05 0.94495467E-09-0.52683769E-13    2
-0.53183125E+04-0.69174660E+02-0.17466440E+01 0.81867337E-01-0.74301955E-04    3
 0.43594628E-07-0.11843736E-10 0.74606335E+03 0.37018688E+02                   4
c5h11-2                c   5h  11o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.15325007E+02 0.21099277E-01-0.57636362E-05 0.78630658E-09-0.43513641E-13    2
-0.13219727E+04-0.53267220E+02-0.57722980E+00 0.62952213E-01-0.50910508E-04    3
 0.26651565E-07-0.66954168E-11 0.35668188E+04 0.30343271E+02                   4
c7h13a                 c   7h  13o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.19985788E+02 0.27150173E-01-0.77585100E-05 0.10954480E-08-0.62164060E-13    2
 0.78442363E+04-0.74423782E+02-0.15743601E+01 0.85106909E-01-0.68578272E-04    3
 0.32770245E-07-0.73131735E-11 0.14230775E+05 0.38216076E+02                   4
c7h13b                 c   7h  13o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.19459541E+02 0.27514804E-01-0.78497133E-05 0.11043960E-08-0.62380826E-13    2
 0.69343750E+04-0.71313179E+02-0.82748979E+00 0.80738954E-01-0.61892650E-04    3
 0.28216736E-07-0.60569770E-11 0.13044476E+05 0.35083202E+02                   4
c6h11a                 c   6h  11o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.17076340E+02 0.22671947E-01-0.63895441E-05 0.89470781E-09-0.50568524E-13    2
 0.11714145E+05-0.60549370E+02-0.16492265E+01 0.75181060E-01-0.65979162E-04    3
 0.35487105E-07-0.88287520E-11 0.17155898E+05 0.36751713E+02                   4
c4h9po2     06/06/08   c   4h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.14816154E+02 0.20659225E-01-0.58967948E-05 0.83020485E-09-0.46928488E-13    2
-0.14095537E+05-0.47163834E+02 0.68769649E-01 0.60231004E-01-0.43222040E-04    3
 0.15151928E-07-0.18727962E-11-0.99075498E+04 0.29480892E+02                   4
ic4h8ooh    06/06/08   c   4h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.15277701E+02 0.19021811E-01-0.51466923E-05 0.69720330E-09-0.38392748E-13    2
-0.81628584E+04-0.45470665E+02 0.17854795E+00 0.68760261E-01-0.71338414E-04    3
 0.43779419E-07-0.11556998E-10-0.43358564E+04 0.30706915E+02                   4
jc4h8ooh    06/06/08   c   4h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.15037083E+02 0.19481055E-01-0.53515664E-05 0.73502343E-09-0.40968693E-13    2
-0.81140293E+04-0.44234024E+02 0.12711961E+01 0.61024886E-01-0.53911226E-04    3
 0.27719405E-07-0.62260214E-11-0.44425908E+04 0.26144821E+02                   4
kc4h8ooh    06/06/08   c   4h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.15608850E+02 0.19036287E-01-0.52136988E-05 0.71496092E-09-0.39829851E-13    2
-0.72223418E+04-0.47598175E+02 0.38921469E+00 0.66329926E-01-0.62847044E-04    3
 0.34517551E-07-0.82759450E-11-0.32418359E+04 0.29849876E+02                   4
io2c4h8ooh  06/03/09   c   4h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.12659351E+02 0.31527895E-01-0.10420144E-04 0.16298725E-08-0.99093944E-13    2
-0.24969453E+05-0.26117828E+02 0.13668505E+01 0.74122682E-01-0.59753726E-04    3
 0.21177552E-07-0.16305609E-11-0.23110443E+05 0.27826979E+02                   4
jo2c4h8ooh  06/06/08   c   4h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.12662881E+02 0.31537537E-01-0.10445309E-04 0.16391498E-08-0.10003683E-12    2
-0.25243428E+05-0.26141502E+02 0.14860160E+01 0.73307693E-01-0.57826339E-04    3
 0.19285764E-07-0.97264015E-12-0.23395098E+05 0.27321854E+02                   4
ko2c4h8ooh  06/06/08   c   4h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.18384247E+02 0.22091642E-01-0.62726426E-05 0.88090829E-09-0.49771958E-13    2
-0.25157244E+05-0.57243683E+02 0.18982897E+01 0.69748670E-01-0.53741434E-04    3
 0.19278648E-07-0.21535074E-11-0.20855559E+05 0.27108002E+02                   4
ioohc4h8o   06/03/09   c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
joohc4h8o   06/06/08   c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
koohc4h8o   06/06/08   c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
mpe5j*o4*o  30/05/08   c   6h   7o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.26021984E+02 0.10006616E+00-0.46365327E-04 0.92042853E-08-0.66228549E-12    2
-0.55842113E+05 0.19581485E+03-0.35109928E+01 0.90841889E-01-0.82082355E-04    3
 0.33025472E-07-0.23296499E-11-0.67457117E+05 0.59873657E+02                   4
mpe5j*o3*o  30/05/08   c   6h   7o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.26021984E+02 0.10006616E+00-0.46365327E-04 0.92042853E-08-0.66228549E-12    2
-0.55842113E+05 0.19581485E+03-0.35109928E+01 0.90841889E-01-0.82082355E-04    3
 0.33025472E-07-0.23296499E-11-0.67457117E+05 0.59873657E+02                   4
mpmj        29/05/08   c   4h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1376.000      1
-0.65457544E+01 0.50001860E-01-0.20455180E-04 0.37180796E-08-0.25107864E-12    2
-0.25358301E+05 0.74641464E+02-0.19636753E+01 0.70822962E-01-0.75273965E-04    3
 0.40685080E-07-0.78564403E-11-0.29798680E+05 0.39156879E+02                   4
mbmj3*o     28/05/08   c   5h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.85018368E+01 0.61372522E-01-0.25957908E-04 0.48305724E-08-0.33172556E-12    2
-0.42100535E+05 0.91900597E+02-0.32151420E+01 0.83294578E-01-0.83867053E-04    3
 0.42743967E-07-0.76287865E-11-0.47064145E+05 0.51600380E+02                   4
mo7oh8j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
```

```
-0.14195902E+01 0.91479316E-01-0.36147667E-04 0.64126389E-08-0.42567436E-12    2
-0.61252094E+05 0.62915550E+02-0.30554850E+01 0.13943858E+00-0.12237918E-03    3
 0.53168254E-07-0.73610588E-11-0.65153824E+05 0.55521027E+02                   4
mo6oh7j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.17161945E+01 0.91441281E-01-0.36021545E-04 0.63741812E-08-0.42224956E-12    2
-0.61627664E+05 0.64748337E+02-0.21969306E+01 0.13430625E+00-0.11388841E-03    3
 0.46849454E-07-0.54943350E-11-0.65728188E+05 0.51913860E+02                   4
mo5oh6j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12    2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03    3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                   4
mo4oh5j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12    2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03    3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                   4
mo3oh4j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12    2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03    3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                   4
mo2oh3j     15/06/06   c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.43076736E+02 0.20371886E-01-0.42784359E-05 0.48343490E-09-0.23699018E-13    2
-0.79226906E+05-0.18764110E+03-0.16416386E+01 0.12874746E+00-0.10402474E-03    3
 0.46773234E-07-0.10213210E-10-0.64982098E+05 0.49877514E+02                   4
mo7oh8oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.77307582E+00 0.95642157E-01-0.37875441E-04 0.67305224E-08-0.44736163E-12    2
-0.78348141E+05 0.56466606E+02-0.11834583E+01 0.14031142E+00-0.10707212E-03    3
 0.31643896E-07 0.10177159E-11-0.82182039E+05 0.51240215E+02                   4
mo6oh7oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.34928293E+01 0.10351229E+00-0.42000131E-04 0.75910958E-08-0.51060062E-12    2
-0.79137297E+05 0.79731750E+02-0.18038790E+01 0.14553791E+00-0.11585146E-03    3
 0.37150976E-07-0.60581138E-13-0.84701922E+05 0.52999142E+02                   4
mo5oh6oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.36199951E+01 0.10372973E+00-0.42108932E-04 0.76128908E-08-0.51214203E-12    2
-0.78816086E+05 0.80438316E+02-0.18100102E+01 0.14556056E+00-0.11585270E-03    3
 0.37096619E-07-0.21603416E-13-0.84429273E+05 0.53025894E+02                   4
mo4oh5oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.36199951E+01 0.10372973E+00-0.42108932E-04 0.76128908E-08-0.51214203E-12    2
-0.78816086E+05 0.80438316E+02-0.18100102E+01 0.14556056E+00-0.11585270E-03    3
 0.37096619E-07-0.21603416E-13-0.84429273E+05 0.53025894E+02                   4
mo3oh4oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.36199951E+01 0.10372973E+00-0.42108932E-04 0.76128908E-08-0.51214203E-12    2
-0.78816086E+05 0.80438316E+02-0.18100102E+01 0.14556056E+00-0.11585270E-03    3
 0.37096619E-07-0.21603416E-13-0.84429273E+05 0.53025894E+02                   4
mo2oh3oo    15/06/06   c   9h  17o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.63741722E+02 0.12518043E-02 0.20508817E-08-0.67711544E-11 0.58922306E-15    2
-0.10632022E+06-0.30111230E+03 0.18851343E+01 0.12085181E+00-0.69817899E-04    3
 0.12731748E-07-0.66569260E-12-0.84041695E+05 0.37408257E+02                   4
mhp6d5j     15/06/06   c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.44219073E-01 0.70866957E-01-0.27805301E-04 0.49079989E-08-0.32463190E-12    2
-0.32030406E+05 0.45783100E+02-0.11977427E+01 0.10105871E+00-0.77244222E-04    3
 0.26512236E-07-0.15066508E-11-0.34569336E+05 0.41984074E+02                   4
mpe5j4*o    14/06/06   c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.87085981E+01 0.71931526E-01-0.30480620E-04 0.56795955E-08-0.39038887E-12    2
-0.44406211E+05 0.93415451E+02-0.99816960E+00 0.88593550E-01-0.80193604E-04    3
 0.34670091E-07-0.41471978E-11-0.50372918E+05 0.39623867E+02                   4
mhx6j5*o    14/06/06   c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.69915266E+01 0.78219064E-01-0.32569340E-04 0.59930012E-08-0.40818160E-12    2
-0.47775875E+05 0.86291542E+02-0.11382353E+01 0.99906430E-01-0.85789550E-04    3
 0.34542023E-07-0.33889519E-11-0.53273879E+05 0.42010025E+02                   4
mb4j*o2*o   14/06/06   c   5h   5o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.58281699E+05 0.59326897E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.58281699E+05 0.59326897E+02                   4
mhx6j*o4*o  14/06/06   c   7h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.26122992E+02 0.10898409E+00-0.49620063E-04 0.97276223E-08-0.69354039E-12    2
-0.57023988E+05 0.19894524E+03-0.11657679E+01 0.97621359E-01-0.85742846E-04    3
 0.32740136E-07-0.14453467E-11-0.69861688E+05 0.48488087E+02                   4
mhp7j*o5*o  14/06/06   c   8h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.24492342E+02 0.11521308E+00-0.51524024E-04 0.99730091E-08-0.70448931E-12    2
-0.60323914E+05 0.19240294E+03-0.14154447E+01 0.10971615E+00-0.93283568E-04    3
 0.34619941E-07-0.14198768E-11-0.72751164E+05 0.51333286E+02                   4
mpe4d3j     14/06/06   c   6h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.31912885E+01 0.57779048E-01-0.23212597E-04 0.41666604E-08-0.27891871E-12    2
-0.25345244E+05 0.59007385E+02-0.72652018E+00 0.77089004E-01-0.62767314E-04    3
 0.23433193E-07-0.18242742E-11-0.28787646E+05 0.36412937E+02                   4
mo8j*o      14/06/06   c   9h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.55258007E+01 0.92573963E-01-0.37460704E-04 0.67579529E-08-0.45396366E-12    2
-0.55506043E+05 0.85218338E+02-0.19721669E+00 0.11688342E+00-0.91450645E-04    3
```

```
 0.32342509E-07-0.17907361E-11-0.61121492E+05 0.42901314E+02                   4
momj*o      14/06/06   c   9h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.13064289E+02 0.61758228E-01-0.22165750E-04 0.36743457E-08-0.23254256E-12    2
-0.63631668E+05-0.19219986E+02 0.14760723E+01 0.10749172E+00-0.77987250E-04    3
 0.28379345E-07-0.32969729E-11-0.61866395E+05 0.35536945E+02                   4
mo8*o       14/06/06   c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.85751486E+01 0.10277593E+00-0.43698288E-04 0.81611606E-08-0.56183828E-12    2
-0.72531508E+05 0.99601158E+02-0.85115528E+00 0.12038428E+00-0.89113324E-04    3
 0.27268390E-07 0.25093924E-12-0.78860695E+05 0.44772598E+02                   4
mom*o       14/06/06   c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10594236E+02 0.70299558E-01-0.27024953E-04 0.47024971E-08-0.30793591E-12    2
-0.80790977E+05-0.77771683E+01 0.12272024E+01 0.10815404E+00-0.69052403E-04    3
 0.16907117E-07 0.96063988E-12-0.79646906E+05 0.35701897E+02                   4
c4h8cho-1   07/06/06   c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
c4h8cho-2   07/06/06   c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 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
c4h8cho-3   07/06/06   c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.68666039E+01 0.32557849E-01-0.11075254E-04 0.17694749E-08-0.10924736E-12    2
-0.73954170E+04-0.83708954E+00-0.52637470E+00 0.70186205E-01-0.74044103E-04    3
 0.46550575E-07-0.12154586E-10-0.66132061E+04 0.32172165E+02                   4
c4h8cho-4   07/06/06   c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 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
bucomeco    07/06/06   c   7h  11o   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
prcoetco    07/06/06   c   7h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
prcomeco    07/06/06   c   6h   9o   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
etcoetco    07/06/06   c   6h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899977E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060309E+05 0.26899633E+02                   4
etcomeco    07/06/06   c   5h   7o   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
mecoetco    07/06/06   c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      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
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
-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
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
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
ic4h5                  c   4h   5    0    0G   300.00   5000.0     1000.0     1
 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      1
 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
c4h3                   c   4h   3o   00   0G   300.00   5000.00  1000.00      1
 0.84874200E+01 0.86908900E-02-0.28544400E-05 0.41201000E-09-0.21300000E-13    2
 0.47970600E+05-0.19019000E+02 0.35539700E+01 0.19461990E-01-0.48102500E-05    3
-0.97301200E-08 0.62390500E-11 0.49453900E+05 0.70830000E+01                   4
nc4h3                  c   4h   3o   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  3o  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
c4h4                 c  4h  4o  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
mhx5d4j   06/06/06   c   7h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.15613327E+01 0.64294070E-01-0.25484620E-04 0.45303472E-08-0.30113648E-12    2
-0.28692469E+05 0.52329239E+02-0.70053124E+00 0.87259173E-01-0.65642540E-04    3
 0.20612276E-07-0.12028033E-12-0.31706502E+05 0.38091030E+02                   4
c5h8    01/06/06     c   5h   8o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.11570503E+02 0.24057562E-01-0.89857949E-05 0.15321914E-08-0.98913472E-13    2
 0.32528965E+04-0.37827194E+02 0.34431732E+01 0.33499036E-01-0.79123965E-05    3
-0.65547534E-09-0.31700375E-12 0.68922251E+04 0.91199865E+01                   4
c6h10    01/06/06    c   6h  10o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000       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    01/06/06    c   7h  12o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000       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
c7h12co     01/06/06    c   8h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.20789326E+02 0.24168372E-01-0.63997218E-05 0.85574348E-09-0.46830920E-13    2
-0.10794459E+05-0.91410126E+02-0.18745028E+01 0.79780355E-01-0.50259776E-04    3
 0.10959952E-07 0.75477715E-12-0.40029751E+04 0.27895624E+02                   4
mo7d6j    01/06/06    c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.18178813E+01 0.77162467E-01-0.29993556E-04 0.52600000E-08-0.34634925E-12    2
-0.35436332E+05 0.38296410E+02-0.13503360E+01 0.11248755E+00-0.83203631E-04    3
 0.26836535E-07-0.94024094E-12-0.37469320E+05 0.44417923E+02                   4
mo6d5j    01/06/06    c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.13683599E+02 0.56885567E-01-0.20007186E-04 0.32709602E-08-0.20510793E-12    2
-0.42091840E+05-0.28672737E+02 0.24752815E+00 0.10495278E+00-0.74950272E-04    3
 0.26095680E-07-0.27432863E-11-0.39573559E+05 0.36570988E+02                   4
mo5d4j    01/06/06    c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.45442657E+01 0.72217926E-01-0.27471253E-04 0.47456412E-08-0.30922481E-12    2
-0.38500227E+05 0.22252907E+02-0.13341333E+01 0.11133200E+00-0.82278188E-04    3
 0.27751108E-07-0.17991589E-11-0.39363270E+05 0.43852840E+02                   4
mo4d3j    01/06/06    c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.45442657E+01 0.72217926E-01-0.27471253E-04 0.47456412E-08-0.30922481E-12    2
-0.38500227E+05 0.22252907E+02-0.13341333E+01 0.11133200E+00-0.82278188E-04    3
 0.27751108E-07-0.17991589E-11-0.39363270E+05 0.43852840E+02                   4
mo3d2j    01/06/06    c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.34822949E+05 0.65780258E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.34822949E+05 0.65780258E+02                   4
mhp6d4d     01/06/06    c   8h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.22469046E+02 0.11055565E+00-0.51111972E-04 0.10130162E-07-0.72802615E-12    2
-0.27521785E+05 0.16854941E+03-0.34527760E+01 0.11001201E+00-0.89478563E-04    3
 0.27745577E-07 0.12397931E-11-0.38274789E+05 0.50552830E+02                   4
mhx5d3d     01/06/06    c   7h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.38136478E+02-0.61676083E-02 0.71911613E-05-0.18594652E-08 0.15392429E-12    2
-0.48841711E+05-0.16985049E+03-0.19962060E+00 0.61237689E-01-0.22540484E-04    3
-0.12777778E-08 0.44975503E-12-0.34502301E+05 0.42158558E+02                   4
mpe4d2d     01/06/06    c   6h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27026245E+02 0.99368177E-01-0.47995258E-04 0.98168957E-08-0.72211600E-12    2
-0.20747236E+05 0.18922659E+03-0.26724977E+01 0.83160140E-01-0.72846997E-04    3
 0.24793362E-07 0.60880424E-12-0.32723355E+05 0.44305882E+02                   4
mhp7o    01/06/06    c   8h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.63277997E-01 0.79896912E-01-0.31290885E-04 0.55157785E-08-0.36446559E-12    2
-0.55331281E+05 0.50041557E+02-0.27305040E+01 0.11764069E+00-0.90000372E-04    3
 0.29700701E-07-0.99984485E-12-0.57885266E+05 0.52174271E+02                   4
mo8ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.11463405E+01 0.94769426E-01-0.38270038E-04 0.68935706E-08-0.46256109E-12    2
-0.76297070E+05 0.50073135E+02-0.29842868E+00 0.13015904E+00-0.91146816E-04    3
 0.22818067E-07 0.24275070E-11-0.79480656E+05 0.45071339E+02                   4
mo7ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.77165094E+05 0.73003487E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.82001703E+05 0.47483391E+02                   4
mo6ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
```

```
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo5ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo4ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo3ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo2ooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13    2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04    3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
momooh   01/06/06    c   9h  18o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.29046974E+01 0.90577140E-01-0.35911162E-04 0.63844583E-08-0.42438627E-12    2
-0.80481422E+05 0.39872284E+02-0.39461792E+01 0.14232999E+00-0.10538402E-03    3
 0.28611993E-07 0.18146426E-11-0.82354047E+05 0.62211113E+02                   4
mo8o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.15501566E+01 0.86463690E-01-0.33614848E-04 0.58951644E-08-0.38814343E-12    2
-0.58673855E+05 0.43448639E+02-0.29764497E+01 0.12969519E+00-0.97409786E-04    3
 0.31417777E-07-0.90680360E-12-0.60774938E+05 0.55005421E+02                   4
mo7o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.27267587E+01 0.94303980E-01-0.37685841E-04 0.67382007E-08-0.44974953E-12    2
-0.58394219E+05 0.66800171E+02-0.35545166E+01 0.13462344E+00-0.10546105E-03    3
 0.36186456E-07-0.17196877E-11-0.62242527E+05 0.56587658E+02                   4
mo6o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211051E+05 0.65548798E+02-0.31961482E+01 0.13215069E+00-0.99559293E-04    3
 0.30339272E-07 0.33297708E-12-0.62009301E+05 0.55066666E+02                   4
mo5o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo4o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo3o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo2o     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.42976402E+02 0.21352954E-01-0.46354780E-05 0.53311217E-09-0.26235099E-13    2
-0.76074609E+05-0.19060928E+03-0.19731333E+01 0.12182116E+00-0.79428959E-04    3
 0.21383739E-07-0.16059263E-11-0.61324738E+05 0.50264374E+02                   4
momo     01/06/06    c   9h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000       1
 0.28740697E+01 0.83087981E-01-0.31736774E-04 0.54964460E-08-0.35867983E-12    2
-0.62698340E+05 0.34945259E+02-0.63202548E+01 0.13972679E+00-0.10642358E-03    3
 0.31908517E-07 0.38937690E-12-0.63680445E+05 0.70170967E+02                   4
mpe5oo    31/05/06    c   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.11794124E+01 0.67327976E-01-0.26784741E-04 0.47736983E-08-0.31788783E-12    2
-0.49383172E+05 0.55336651E+02-0.84760487E+00 0.97614326E-01-0.79072466E-04    3
 0.26808342E-07-0.75868391E-12-0.52849410E+05 0.41667435E+02                   4
mpe5ooh4j   31/05/06    c   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.60995616E-01 0.64236596E-01-0.25018233E-04 0.43928678E-08-0.28946886E-12    2
-0.43661156E+05 0.53517467E+02-0.77777320E+00 0.10641504E+00-0.10782654E-03    3
 0.56058742E-07-0.10659003E-10-0.47273395E+05 0.43064930E+02                   4
mpe5ooh3j   31/05/06    c   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.60995616E-01 0.64236596E-01-0.25018233E-04 0.43928678E-08-0.28946886E-12    2
-0.43661156E+05 0.53517467E+02-0.77777320E+00 0.10641504E+00-0.10782654E-03    3
 0.56058742E-07-0.10659003E-10-0.47273395E+05 0.43064930E+02                   4
mpe5ooh2j   31/05/06    c   6h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.55351073E+00 0.66277191E-01-0.26260022E-04 0.46679931E-08-0.31033729E-12    2
-0.46823195E+05 0.53401531E+02-0.32106036E+00 0.10213961E+00-0.94775001E-04    3
 0.42939234E-07-0.62246553E-11-0.50533480E+05 0.38912380E+02                   4
mpecy3o5    31/05/06    c   6h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.25929640E+02 0.11287239E+00-0.55475419E-04 0.11491243E-07-0.85329009E-12    2
-0.56855973E+05 0.17955170E+03-0.47936420E+01 0.10713824E+00-0.90853275E-04    3
 0.28869142E-07 0.12092014E-11-0.68089250E+05 0.50664215E+02                   4
mpecy2o5    31/05/06    c   6h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.25929640E+02 0.11287239E+00-0.55475419E-04 0.11491243E-07-0.85329009E-12    2
-0.56855973E+05 0.17955170E+03-0.47936420E+01 0.10713824E+00-0.90853275E-04    3
 0.28869142E-07 0.12092014E-11-0.68089250E+05 0.50664215E+02                   4
mpe5ooh4oo  31/05/06    c   6h  11o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
```

```
-0.21457834E+01 0.76921917E-01-0.31299642E-04 0.56677267E-08-0.38170305E-12    2
-0.60832227E+05 0.70091110E+02 0.60747337E+00 0.11059815E+00-0.93982453E-04    3
 0.31883012E-07-0.44127538E-12-0.66071234E+05 0.40013927E+02                   4
mpe5ooh3oo  31/05/06    c   6h  11o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20768893E+01 0.76801077E-01-0.31233601E-04 0.56531344E-08-0.38056865E-12    2
-0.60859195E+05 0.69707619E+02 0.57979995E+00 0.11079118E+00-0.94452225E-04    3
 0.32360951E-07-0.61428044E-12-0.66068273E+05 0.40130882E+02                   4
mpe5ooh2oo  31/05/06    c   6h  11o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.39949493E+02 0.10406585E-01-0.16931812E-05 0.15173407E-09-0.60581058E-14    2
-0.77409305E+05-0.16732471E+03 0.19985974E+01 0.98982193E-01-0.70369191E-04    3
 0.18947080E-07-0.75476696E-12-0.65403305E+05 0.34515236E+02                   4
mpe3ooh5*o  31/05/06    c   6h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14662412E+02 0.93957052E-01-0.42557505E-04 0.83121066E-08-0.59100489E-12    2
-0.73968984E+05 0.13532010E+03 0.14699309E+01 0.96330002E-01-0.79727441E-04    3
 0.25157989E-07 0.99966617E-12-0.83427430E+05 0.34080875E+02                   4
mpe2ooh5*o  31/05/06    c   6h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11127309E+02 0.88265002E-01-0.39570550E-04 0.76723250E-08-0.54261554E-12    2
-0.74710500E+05 0.11518449E+03 0.38398278E+00 0.98629996E-01-0.79378136E-04    3
 0.23175076E-07 0.16838372E-11-0.82456078E+05 0.39481899E+02                   4
mpe4ooh5*o  31/05/06    c   6h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11127309E+02 0.88265002E-01-0.39570550E-04 0.76723250E-08-0.54261554E-12    2
-0.74710500E+05 0.11449141E+03 0.38398278E+00 0.98629996E-01-0.79378136E-04    3
 0.23175076E-07 0.16838372E-11-0.82456078E+05 0.38788818E+02                   4
oaoj2*o     30/05/06    c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.50566457E+05 0.65813957E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.50566457E+05 0.65813957E+02                   4
c2h5coc2h4   29/05/06   c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.15697845E+02 0.19031726E-01-0.52147357E-05 0.71394135E-09-0.39655484E-13    2
-0.13728694E+05-0.52360275E+02-0.16847492E+01 0.67190818E-01-0.59479593E-04    3
 0.32237519E-07-0.80699102E-11-0.86122041E+04 0.38187481E+02                   4
mhx6*o     29/05/06    c   7h  12o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.12157108E+02 0.90588890E-01-0.39811232E-04 0.76105007E-08-0.53275087E-12    2
-0.65759461E+05 0.11461126E+03-0.32118267E+00 0.96001990E-01-0.73607909E-04    3
 0.23112262E-07 0.33480830E-12-0.73085328E+05 0.38952679E+02                   4
mpe5*o     29/05/06    c   6h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13791258E+02 0.84301457E-01-0.37831418E-04 0.73403816E-08-0.51941074E-12    2
-0.62446332E+05 0.12120752E+03-0.82330197E-01 0.84006540E-01-0.66365050E-04    3
 0.21586454E-07 0.16528493E-12-0.70195047E+05 0.36151474E+02                   4
mhx6j*o    29/05/06    c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.89733496E+01 0.79922460E-01-0.33141045E-04 0.60808949E-08-0.41335495E-12    2
-0.48751082E+05 0.99583961E+02 0.33462444E+00 0.92481129E-01-0.75881078E-04    3
 0.28108058E-07-0.16747699E-11-0.55346223E+05 0.37071075E+02                   4
mpe5j*o    29/05/06    c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10523424E+02 0.73326841E-01-0.30864318E-04 0.57219371E-08-0.39176602E-12    2
-0.45446195E+05 0.10578487E+03 0.49315983E+00 0.81042960E-01-0.69977716E-04    3
 0.27920230E-07-0.23180869E-11-0.52447348E+05 0.34607738E+02                   4
mhx6j5*o    29/05/06    c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.69915266E+01 0.78219064E-01-0.32569340E-04 0.59930012E-08-0.40818160E-12    2
-0.47775875E+05 0.86291542E+02-0.11382353E+01 0.99906430E-01-0.85789550E-04    3
 0.34542023E-07-0.33889519E-11-0.53273879E+05 0.42010025E+02                   4
mhx6j4*o    29/05/06    c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.19924454E+02 0.99570557E-01-0.43679371E-04 0.83392733E-08-0.58322731E-12    2
-0.41332730E+05 0.16056046E+03-0.17016495E+01 0.10753243E+00-0.10537948E-03    3
 0.50357595E-07-0.72712487E-11-0.52136746E+05 0.45235870E+02                   4
mpe5j4*o    29/05/06    c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.87085981E+01 0.71931526E-01-0.30480620E-04 0.56795955E-08-0.39038887E-12    2
-0.44406211E+05 0.93415451E+02-0.99816960E+00 0.88593550E-01-0.80193604E-04    3
 0.34670091E-07-0.41471978E-11-0.50372918E+05 0.39623867E+02                   4
mpe5j3*o    29/05/06    c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20214968E+02 0.91222845E-01-0.40646319E-04 0.78474303E-08-0.55333093E-12    2
-0.39978219E+05 0.15966469E+03-0.40681415E+01 0.10087004E+00-0.10192383E-03    3
 0.50771501E-07-0.81750526E-11-0.49729480E+05 0.56715321E+02                   4
mb4j3*o    29/05/06    c   5h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90541220E+01 0.63599467E-01-0.27383188E-04 0.51595150E-08-0.35744278E-12    2
-0.43020027E+05 0.92859528E+02-0.31302316E+01 0.80275625E-01-0.72685136E-04    3
 0.30962674E-07-0.35665145E-11-0.47990324E+05 0.50114769E+02                   4
mb4j2*o    29/05/06    c   5h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.40417121E+05 0.55247940E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.40417121E+05 0.55247940E+02                   4
c6h13coco    29/05/06    c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000   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
c4h9cocho 17/10/08     c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
c6h12co    17/10/08     c   7h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18387564E+02 0.23619767E-01-0.62005138E-05 0.82163981E-09-0.44565798E-13    2
-0.19324014E+05-0.79413521E+02-0.88079184E+00 0.66917494E-01-0.36559337E-04    3
 0.62133636E-08 0.88510877E-12-0.13118779E+05 0.23539595E+02                   4
c7h14co    29/05/06     c   8h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.21274084E+02 0.28127572E-01-0.75822236E-05 0.10261592E-08-0.56566575E-13    2
-0.23182180E+05-0.93158524E+02-0.91747171E+00 0.77609986E-01-0.40984742E-04    3
 0.53076636E-08 0.17625613E-11-0.16031861E+05 0.25472212E+02                   4
mhp7*o     29/05/06     c   8h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10365763E+02 0.96658662E-01-0.41725994E-04 0.78767917E-08-0.54644543E-12    2
-0.69141859E+05 0.10711480E+03-0.35745937E+00 0.10660749E+00-0.77554687E-04    3
 0.21395978E-07 0.16336575E-11-0.75997500E+05 0.40893982E+02                   4
mhp7j*o    29/05/06     c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.72279239E+01 0.86201996E-01-0.35270521E-04 0.64120376E-08-0.43305916E-12    2
-0.52135340E+05 0.92285492E+02-0.98554157E-02 0.10522509E+00-0.84965897E-04    3
 0.31520614E-07-0.21908389E-11-0.58225422E+05 0.40319351E+02                   4
c2h4cho    29/05/06     c   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.38802774E+01 0.19560963E-01-0.65248419E-05 0.10275587E-08-0.62784000E-13    2
 0.26971973E+03 0.10725105E+02 0.30829394E+00 0.42721864E-01-0.48484926E-04    3
 0.31577844E-07-0.82415281E-11 0.24612408E+03 0.25079893E+02                   4
ch3coc2h4    29/05/06   c   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.14588371E+02 0.11932881E-01-0.28472325E-05 0.35024431E-09-0.17976966E-13    2
-0.10436764E+05-0.48007145E+02 0.16242706E+01 0.46672814E-01-0.44106699E-04    3
 0.27902210E-07-0.80798337E-11-0.63650942E+04 0.20266968E+02                   4
mhp7j6*o    29/05/06    c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.51898031E+01 0.84392361E-01-0.34631797E-04 0.63076122E-08-0.42649703E-12    2
-0.51182059E+05 0.78680923E+02-0.13321880E+01 0.11160109E+00-0.92342736E-04    3
 0.35418459E-07-0.30048407E-11-0.56169102E+05 0.44621166E+02                   4
mhp7oo6*o    THERGAS    c   8h  13o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.85021143E+01 0.96763588E-01-0.40402028E-04 0.74497191E-08-0.50820329E-12    2
-0.64693648E+05 0.10506303E+03 0.65410101E+00 0.11834550E+00-0.97551609E-04    3
 0.34519772E-07-0.13038962E-11-0.72199336E+05 0.39982597E+02                   4
mhp7o6*o     THERGAS    c   8h  13o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10854543E+02 0.96662886E-01-0.40539162E-04 0.74979027E-08-0.51258368E-12    2
-0.63869184E+05 0.11427966E+03-0.75260472E+00 0.11436508E+00-0.93879979E-04    3
 0.34161843E-07-0.17816726E-11-0.71454117E+05 0.44895462E+02                   4
mhp7j5*o     29/05/06   c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18342747E+02 0.10601428E+00-0.45800287E-04 0.86511145E-08-0.60044504E-12    2
-0.44634406E+05 0.15422903E+03-0.18161272E+01 0.11867393E+00-0.11059207E-03    3
 0.49876693E-07-0.63979906E-11-0.55040473E+05 0.47510975E+02                   4
mhp7oo5*o    THERGAS    c   8h  13o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16257727E+02 0.11036374E+00-0.47609286E-04 0.89818419E-08-0.62276833E-12    2
-0.62315270E+05 0.14837640E+03-0.54653388E+00 0.12370123E+00-0.10519405E-03    3
 0.38162888E-07-0.14609415E-11-0.72627914E+05 0.45784737E+02                   4
mhp7o5*o     THERGAS    c   8h  13o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18487974E+02 0.11007208E+00-0.47669986E-04 0.90188035E-08-0.62663454E-12    2
-0.61540367E+05 0.15690442E+03-0.18351741E+01 0.11892033E+00-0.99651537E-04    3
 0.35994429E-07-0.13189102E-11-0.71895562E+05 0.50194668E+02                   4
mhp7j4*o     03/10/08   c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18342747E+02 0.10601428E+00-0.45800287E-04 0.86511145E-08-0.60044504E-12    2
-0.44634406E+05 0.15422903E+03-0.18161272E+01 0.11867393E+00-0.11059207E-03    3
 0.49876693E-07-0.63979906E-11-0.55040473E+05 0.47510975E+02                   4
mhp7oo4*o    THERGAS    c   8h  13o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16257727E+02 0.11036374E+00-0.47609286E-04 0.89818419E-08-0.62276833E-12    2
-0.62315227E+05 0.14837601E+03-0.56160235E+00 0.12380358E+00-0.10543524E-03    3
 0.38399641E-07-0.15435409E-11-0.72626250E+05 0.45848415E+02                   4
mhp7o4*o     THERGAS    c   8h  13o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18487974E+02 0.11007208E+00-0.47669986E-04 0.90188035E-08-0.62663454E-12    2
-0.61540328E+05 0.15690378E+03-0.18502426E+01 0.11902268E+00-0.99892721E-04    3
 0.36231185E-07-0.14015096E-11-0.71893898E+05 0.50258102E+02                   4
c7ald4oxo  29/05/06     c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mo         23/05/06     c   9h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17790666E+01 0.92426240E-01-0.37587652E-04 0.68048287E-08-0.45826857E-12    2
-0.65513801E+05 0.57186504E+02-0.24077647E+01 0.12267257E+00-0.85769956E-04    3
 0.24118631E-07 0.68107358E-12-0.68503812E+05 0.49318127E+02                   4
momj       23/05/06     c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.21430559E+01 0.81711859E-01-0.31436884E-04 0.54711564E-08-0.35820381E-12    2
-0.42309621E+05 0.38241669E+02-0.31637552E+01 0.13091597E+00-0.11197244E-03    3
 0.49020258E-07-0.73404850E-11-0.44250500E+05 0.53192684E+02                   4
mo2j       23/05/06     c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.14161301E+01 0.83496340E-01-0.32428838E-04 0.56825376E-08-0.37389522E-12    2
-0.46085918E+05 0.39750984E+02-0.29214220E+01 0.12909919E+00-0.10748007E-03    3
 0.45228298E-07-0.62095698E-11-0.48252020E+05 0.49913494E+02                   4
mo3j       24/05/06     c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
```

```
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo4j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo5j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo6j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo7j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo8j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.21430559E+01 0.81711859E-01-0.31436884E-04 0.54711564E-08-0.35820381E-12    2
-0.41957363E+05 0.38241669E+02-0.31637552E+01 0.13091597E+00-0.11197244E-03    3
 0.49020258E-07-0.73404850E-11-0.43898242E+05 0.53192684E+02                   4
mhp7j     24/05/06      c   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.87399170E-01 0.75898319E-01-0.29505754E-04 0.51752189E-08-0.34081952E-12    2
-0.38438184E+05 0.47305195E+02-0.28603144E+01 0.11843847E+00-0.10347623E-03    3
 0.46138059E-07-0.69908341E-11-0.41014422E+05 0.50120590E+02                   4
mhx6j     24/05/06      c   7h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.15547460E+01 0.69381967E-01-0.27211119E-04 0.48027240E-08-0.31770512E-12    2
-0.35083844E+05 0.54057785E+02-0.26617866E+01 0.10671473E+00-0.96865195E-04    3
 0.45221036E-07-0.73678659E-11-0.38119703E+05 0.47488998E+02                   4
mpe5j     24/05/06      c   6h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.31604998E+01 0.62802054E-01-0.24874196E-04 0.44188231E-08-0.29354852E-12    2
-0.31745641E+05 0.60604359E+02-0.24634216E+01 0.94982199E-01-0.90206187E-04    3
 0.44228038E-07-0.77081223E-11-0.35224848E+05 0.44858868E+02                   4
oaoj      24/05/06      c   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.49090858E+02 0.18508758E-02-0.60037735E-07 0.41440281E-12 0.70758472E-16    2
-0.60508773E+05-0.23452615E+03 0.20212417E+01 0.83619110E-01-0.35811991E-04    3
 0.52556227E-10 0.99690005E-12-0.42618359E+05 0.26460386E+02                   4
mo7d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.35566139E+00 0.84852763E-01-0.34587043E-04 0.62691745E-08-0.42242278E-12    2
-0.50782367E+05 0.49556068E+02-0.17868280E+01 0.11454793E+00-0.78740493E-04    3
 0.19759190E-07 0.18626116E-11-0.53310484E+05 0.46755840E+02                   4
mo6d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.11910077E+02 0.63574977E-01-0.23789020E-04 0.40636787E-08-0.26278610E-12    2
-0.57033414E+05-0.19272614E+02-0.19152652E+00 0.10652496E+00-0.68284025E-04    3
 0.16246911E-07 0.11500849E-11-0.54903516E+05 0.39205524E+02                   4
mo5d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.24260066E+01 0.79790533E-01-0.31941181E-04 0.57178360E-08-0.38195440E-12    2
-0.53351547E+05 0.33466812E+02-0.19614061E+01 0.11416736E+00-0.78591700E-04    3
 0.20840977E-07 0.10634274E-11-0.54672230E+05 0.47320042E+02                   4
mo4d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.24260066E+01 0.79790533E-01-0.31941181E-04 0.57178360E-08-0.38195440E-12    2
-0.53351547E+05 0.33466812E+02-0.19614061E+01 0.11416736E+00-0.78591700E-04    3
 0.20840977E-07 0.10634274E-11-0.54672230E+05 0.47320042E+02                   4
mo3d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.53543472E+02-0.92159994E-02 0.11456344E-04-0.30169143E-08 0.25174117E-12    2
-0.73902039E+05-0.25000227E+03 0.52355224E+00 0.82320824E-01-0.28386969E-04    3
-0.16632727E-08 0.58790771E-12-0.53775070E+05 0.44095951E+02                   4
mo2d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.16953121E+00 0.82326099E-01-0.32999909E-04 0.59115428E-08-0.39502248E-12    2
-0.52731004E+05 0.46604263E+02-0.16706425E+01 0.11139970E+00-0.76697812E-04    3
 0.21219268E-07 0.66340623E-12-0.54900281E+05 0.46723911E+02                   4
mhp6d     24/05/06      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.22571309E+01 0.78844160E-01-0.32607102E-04 0.59716014E-08-0.40537167E-12    2
-0.47335234E+05 0.57728497E+02-0.16361413E+01 0.10314068E+00-0.72847564E-04    3
 0.19513047E-07 0.12650552E-11-0.50410445E+05 0.44331142E+02                   4
mhx5d     24/05/06      c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.39540703E+01 0.72504982E-01-0.30471969E-04 0.56443858E-08-0.38628706E-12    2
-0.43972320E+05 0.64749664E+02-0.12938293E+01 0.90416260E-01-0.63824511E-04    3
 0.16181136E-07 0.17447221E-11-0.47531074E+05 0.41093353E+02                   4
mpe4d     24/05/06      c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.56343269E+01 0.66171221E-01-0.28369999E-04 0.53298788E-08-0.36849460E-12    2
-0.40620254E+05 0.71663795E+02-0.11484917E+01 0.79075053E-01-0.58166061E-04    3
 0.16247890E-07 0.10083412E-11-0.44630855E+05 0.38687386E+02                   4
mb3d      24/05/06      c   5h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.28680710E+02-0.52132295E-02 0.66594753E-05-0.17697870E-08 0.14833187E-12    2
-0.51735703E+05-0.11966117E+03-0.76623303E+00 0.44696096E-01-0.13475134E-04    3
-0.26875515E-08 0.94983624E-12-0.40462742E+05 0.44014626E+02                   4
mp2d      24/05/06      c   4h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.11442745E+02 0.56594063E-01-0.25690231E-04 0.50260978E-08-0.35783082E-12    2
-0.33257324E+05 0.99588028E+02-0.41298971E+00 0.52523907E-01-0.42228967E-04    3
 0.13957491E-07 0.15500073E-12-0.39074504E+05 0.32631355E+02                   4
mo8oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.35980105E+01 0.87122373E-01-0.33787193E-04 0.59147984E-08-0.38893178E-12    2
-0.59385668E+05 0.35912323E+02-0.15787870E+01 0.13371134E+00-0.10109011E-03    3
 0.31698441E-07-0.36949678E-12-0.61518844E+05 0.50135460E+02                   4
mo7oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60281102E+05 0.57565117E+02-0.19428034E+01 0.13717867E+00-0.10570075E-03    3
 0.33110066E-07-0.23308690E-13-0.64066406E+05 0.50807755E+02                   4
mo6oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57563408E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489834E+02                   4
mo5oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562874E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489296E+02                   4
mo4oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562645E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489067E+02                   4
mo3oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562569E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50488991E+02                   4
mo2oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.45951244E+02 0.20701475E-01-0.43656855E-05 0.48959875E-09-0.23591824E-13    2
-0.78246141E+05-0.20343892E+03-0.37396055E+00 0.12454471E+00-0.80329410E-04    3
 0.19275163E-07-0.37104437E-12-0.63148215E+05 0.44527905E+02                   4
momoo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.51516218E+01 0.83369441E-01-0.31735457E-04 0.54841371E-08-0.35738516E-12    2
-0.63500832E+05 0.26123825E+02-0.52331142E+01 0.14590822E+00-0.11534456E-03    3
 0.37470183E-07-0.96269726E-12-0.64391238E+05 0.66614120E+02                   4
mo8ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo8ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo8ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo7ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53943406E+05 0.54096909E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57749656E+05 0.51312267E+02                   4
mo7ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo7ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo7ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo6ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53319406E+05 0.53403824E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57125656E+05 0.50619186E+02                   4
mo6ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo6ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo6ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo6ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53319406E+05 0.53403824E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57125656E+05 0.50619186E+02                   4
mo5ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo5ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo5ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465891E+05 0.54748520E+02-0.13272338E+01 0.14110728E+00-0.12000381E-03    3
 0.47870905E-07-0.50123551E-11-0.61488648E+05 0.47020748E+02                   4
mo4ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo4ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465785E+05 0.54762970E+02-0.13867182E+01 0.14151900E+00-0.12098959E-03    3
 0.48851280E-07-0.53580538E-11-0.61482277E+05 0.47286896E+02                   4
mo3ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465785E+05 0.54762970E+02-0.13867182E+01 0.14151900E+00-0.12098959E-03    3
 0.48851280E-07-0.53580538E-11-0.61482277E+05 0.47286896E+02                   4
mo2ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2oohmj  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.46503025E+02 0.19567983E-01-0.39896295E-05 0.43868473E-09-0.20998982E-13    2
-0.71641672E+05-0.20256317E+03-0.15821233E+00 0.13139309E+00-0.10180825E-03    3
 0.40538520E-07-0.74601480E-11-0.56823902E+05 0.45338642E+02                   4
momooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.58239369E+01 0.82248792E-01-0.31178013E-04 0.53714713E-08-0.34927001E-12    2
-0.60961531E+05 0.23976868E+02-0.43981757E+01 0.14833368E+00-0.12605920E-03    3
 0.48663207E-07-0.46926161E-11-0.62109066E+05 0.62599686E+02                   4
mo8ooh7oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.29467473E+01 0.96120849E-01-0.37956248E-04 0.67306494E-08-0.44666899E-12    2
-0.70949086E+05 0.48242790E+02 0.15096016E-01 0.14576319E+00-0.11384734E-03    3
 0.34718074E-07 0.64080517E-12-0.74755922E+05 0.47196110E+02                   4
mo8ooh6oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974180E+05 0.47893349E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03    3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215572E+02                   4
mo8ooh5oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974180E+05 0.47893242E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03    3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215458E+02                   4
mo7ooh8oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.29467473E+01 0.96120849E-01-0.37956248E-04 0.67306494E-08-0.44666899E-12    2
-0.70949086E+05 0.48242989E+02 0.15096016E-01 0.14576319E+00-0.11384734E-03    3
 0.34718074E-07 0.64080517E-12-0.74755922E+05 0.47196308E+02                   4
mo7ooh6oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo7ooh5oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512329E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089092E+02                   4
mo7ooh4oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512329E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089092E+02                   4
mo6ooh8oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974180E+05 0.47893486E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03    3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215710E+02                   4
mo6ooh7oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh5oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh4oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh3oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh8oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12    2
-0.70974180E+05 0.47893486E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03    3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215710E+02                   4
mo5ooh7oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh6oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh4oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh3oo 24/05/06      c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
```

```
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo4ooh7oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo3ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo3ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo3ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12    2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03    3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo3ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31202051E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.33513641E+02                   4
mo2ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99194828E+05-0.31201968E+03 0.31034703E+01 0.12628835E+00-0.76920333E-04    3
 0.16552155E-07-0.14650131E-11-0.76619188E+05 0.33959225E+02                   4
mo2ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99194828E+05-0.31201968E+03 0.31034703E+01 0.12628835E+00-0.76920333E-04    3
 0.16552155E-07-0.14650131E-11-0.76619188E+05 0.33959225E+02                   4
mo2ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99194828E+05-0.31201968E+03 0.31034703E+01 0.12628835E+00-0.76920333E-04    3
 0.16552155E-07-0.14650131E-11-0.76619188E+05 0.33959225E+02                   4
mo2ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15    2
-0.99195016E+05-0.31271368E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04    3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820442E+02                   4
mo2oohmoo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.82249975E+01 0.86596146E-01-0.33072454E-04 0.57288259E-08-0.37397657E-12    2
-0.75919445E+05 0.17837921E+02-0.46953363E+01 0.16008772E+00-0.12742764E-03    3
 0.38272756E-07 0.78343853E-12-0.76660641E+05 0.69637123E+02                   4
momooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.82249975E+01 0.86596146E-01-0.33072454E-04 0.57288259E-08-0.37397657E-12    2
-0.75919406E+05 0.17143936E+02-0.47254734E+01 0.16029242E+00-0.12791003E-03    3
 0.38746261E-07 0.61823967E-12-0.76657344E+05 0.69071274E+02                   4
mo7ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.54960790E+01 0.10600425E+00-0.45038698E-04 0.84062837E-08-0.57840478E-12    2
-0.84955789E+05 0.91273170E+02-0.22201397E+00 0.13392125E+00-0.99631099E-04    3
 0.26486974E-07 0.25650137E-11-0.91139742E+05 0.47407669E+02                   4
mo6ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.95882120E+01 0.11257987E+00-0.48428621E-04 0.91196721E-08-0.63156826E-12    2
-0.83982211E+05 0.11385841E+03 0.73632115E+00 0.13247329E+00-0.10193008E-03    3
 0.30305809E-07 0.12726949E-11-0.92097023E+05 0.41858250E+02                   4
mo5ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.94011478E+01 0.11224698E+00-0.48242477E-04 0.90777830E-08-0.62826849E-12    2
-0.84055234E+05 0.11281860E+03 0.88079315E+00 0.13146219E+00-0.99486249E-04    3
```

```
 0.27860226E-07 0.21377080E-11-0.92112328E+05 0.41247841E+02                   4
mo8ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.95082121E+01 0.11150547E+00-0.47671056E-04 0.89378815E-08-0.61703946E-12    2
-0.84919836E+05 0.11345003E+03 0.16344066E+01 0.12721752E+00-0.95892952E-04    3
 0.28216830E-07 0.12864080E-11-0.93044945E+05 0.37976269E+02                   4
mo6ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.41200852E+01 0.10340482E+00-0.43625707E-04 0.81021811E-08-0.55550286E-12    2
-0.89182547E+05 0.82319649E+02-0.57328528E+00 0.13398756E+00-0.10003670E-03    3
 0.27948868E-07 0.17152752E-11-0.94632883E+05 0.48258713E+02                   4
mo5ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.78532286E+01 0.10932972E+00-0.46648998E-04 0.87330818E-08-0.60219473E-12    2
-0.88345797E+05 0.10361024E+03 0.68202120E+00 0.13049370E+00-0.97469383E-04    3
 0.26971458E-07 0.20957515E-11-0.95622094E+05 0.42143093E+02                   4
mo4ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.78532286E+01 0.10932972E+00-0.46648998E-04 0.87330818E-08-0.60219473E-12    2
-0.88345797E+05 0.10361024E+03 0.68202120E+00 0.13049370E+00-0.97469383E-04    3
 0.26971458E-07 0.20957515E-11-0.95622094E+05 0.42143093E+02                   4
mo8ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12    2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04    3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo7ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo5ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.15954890E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50282253E+02                   4
mo4ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12    2
-0.83135531E+05 0.17977809E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03    3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.43896904E+02                   4
mo3ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12    2
-0.83135531E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03    3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.44589985E+02                   4
mo8ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12    2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04    3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo7ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12    2
-0.83407273E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03    3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.96035055E+05 0.44589985E+02                   4
mo6ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12    2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03    3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo4ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12    2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03    3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo3ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12    2
-0.83407273E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03    3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.96035055E+05 0.44589985E+02                   4
mo2ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo7ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12    2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04    3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo6ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12    2
-0.83135531E+05 0.17977809E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03    3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.43896904E+02                   4
mo5ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12    2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03    3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo3ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo2ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
```

```
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12    2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03    3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo6ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20145365E+02 0.13134094E+00-0.58573514E-04 0.11315033E-07-0.79813369E-12    2
-0.85111406E+05 0.17207744E+03-0.22760024E+01 0.13957317E+00-0.10760363E-03    3
 0.30881012E-07 0.22776512E-11-0.96260164E+05 0.57632141E+02                   4
mo5ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20145365E+02 0.13134094E+00-0.58573514E-04 0.11315033E-07-0.79813369E-12    2
-0.85111406E+05 0.17207744E+03-0.22760024E+01 0.13957317E+00-0.10760363E-03    3
 0.30881012E-07 0.22776512E-11-0.96260164E+05 0.57632141E+02                   4
mo4ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo2ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo6ooh2*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo5ooh2*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo4ooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo3ooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12    2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03    3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
momooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13    2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04    3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
mo2oohm*o 24/05/06       c   9h  16o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13    2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04    3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
mocy8o6    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy8o5    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.26874338E+02 0.14054599E+00-0.65425294E-04 0.13032252E-07-0.94011094E-12    2
-0.64983344E+05 0.19323114E+03-0.43543243E+01 0.14035048E+00-0.11182443E-03    3
 0.34362870E-07 0.13960118E-11-0.77739094E+05 0.53369232E+02                   4
mocy7o5    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy7o4    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.30665367E+02 0.14818263E+00-0.69889604E-04 0.14052839E-07-0.10207531E-11    2
-0.66054234E+05 0.21287505E+03-0.46974769E+01 0.14367707E+00-0.11610613E-03    3
 0.35454022E-07 0.18533020E-11-0.80288938E+05 0.53256794E+02                   4
mocy6o4    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy6o3    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.30665367E+02 0.14818263E+00-0.69889604E-04 0.14052839E-07-0.10207531E-11    2
-0.65782500E+05 0.21287505E+03-0.46974769E+01 0.14367707E+00-0.11610613E-03    3
 0.35454022E-07 0.18533020E-11-0.80017211E+05 0.53256794E+02                   4
mocy5o3    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy5o2    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27323215E+02 0.14275895E+00-0.66992274E-04 0.13421326E-07-0.97226426E-12    2
-0.66437305E+05 0.19384650E+03-0.59087501E+01 0.14684899E+00-0.11785338E-03    3
 0.35560749E-07 0.18005568E-11-0.79032508E+05 0.59188107E+02                   4
mocy4o2    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
```

```
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy2om    30/05/06      c   9h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.21478661E+02 0.13002488E+00-0.59388556E-04 0.11669496E-07-0.83340702E-12    2
-0.69823938E+05 0.16074477E+03-0.87842989E+01 0.15273909E+00-0.12077823E-03    3
 0.33323197E-07 0.31567210E-11-0.79623625E+05 0.72820412E+02                   4
mhp7*o6*o 24/05/06       c   8h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.35813737E+01 0.70903733E-01-0.28868621E-04 0.52286273E-08-0.35212274E-12    2
-0.84094453E+05 0.26783569E+02 0.51494056E+00 0.10360426E+00-0.74732103E-04    3
 0.19272008E-07 0.17387591E-11-0.86019484E+05 0.32993095E+02                   4
mhp7*o5*o 24/05/06       c   8h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27326954E+02 0.12589554E+00-0.58685469E-04 0.11700639E-07-0.84460347E-12    2
-0.77571219E+05 0.20518336E+03-0.19825046E+01 0.11261459E+00-0.89498913E-04    3
 0.28100716E-07 0.11333910E-11-0.90499656E+05 0.52836594E+02                   4
mhp7*o4*o 24/05/06       c   8h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28662657E+02 0.12795980E+00-0.59757946E-04 0.11930251E-07-0.86201592E-12    2
-0.75617734E+05 0.21262198E+03 0.53591490E+00 0.10789542E+00-0.87213477E-04    3
 0.27685866E-07 0.13195994E-11-0.90007500E+05 0.38920273E+02                   4
mhx6*o5*o 24/05/06       c   7h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.17607889E+01 0.64756542E-01-0.26821468E-04 0.49181721E-08-0.33420594E-12    2
-0.80678617E+05 0.34505310E+02 0.90133715E+00 0.90572514E-01-0.64965636E-04    3
 0.15191349E-07 0.24862566E-11-0.83144812E+05 0.29568800E+02                   4
mhx6*o4*o 24/05/06       c   7h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28524403E+02 0.11911192E+00-0.56631950E-04 0.11452694E-07-0.83539924E-12    2
-0.74476305E+05 0.20921518E+03-0.15762408E+01 0.99448055E-01-0.79418125E-04    3
 0.23717195E-07 0.19839983E-11-0.87627148E+05 0.49327797E+02                   4
mhx6*o3*o 24/05/06       c   7h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28524403E+02 0.11911192E+00-0.56631950E-04 0.11452694E-07-0.83539924E-12    2
-0.74476297E+05 0.20921518E+03-0.15762408E+01 0.99448055E-01-0.79418125E-04    3
 0.23717195E-07 0.19839983E-11-0.87627141E+05 0.49327797E+02                   4
mpe5*o4*o 24/05/06       c   6h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.55639572E-01 0.58433972E-01-0.24689954E-04 0.45901998E-08-0.31494284E-12    2
-0.77313953E+05 0.41569912E+02 0.95344263E+00 0.79850294E-01-0.60724255E-04    3
 0.16603190E-07 0.12975738E-11-0.80234234E+05 0.27561476E+02                   4
mpe5*o3*o 24/05/06       c   6h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
mpe5*o2*o  as mpe5*o3*o c   6h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
mb4*o3*o  24/05/06       c   5h   6o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20653464E+00 0.49957778E-01-0.21522896E-04 0.40570503E-08-0.28115048E-12    2
-0.75958836E+05 0.40554443E+02-0.13199506E+01 0.72539322E-01-0.55702723E-04    3
 0.15445821E-07 0.95270352E-12-0.77836883E+05 0.38649303E+02                   4
mb4*o2*o  as mpe5*o3*o  c   5h   6o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
c5h11cocho  29/05/06     c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
nc4h9cocho  29/05/06     c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
c3h7cocho  29/05/06      c   5h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
c6ald4oxo  29/05/06      c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899977E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060309E+05 0.26899633E+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
c2h5cocho  29/05/06      c   4h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
 0.45236079E-08 0.57545120E-12-0.37283613E+05 0.15680321E+02                   4
c5ald4oxo  29/05/06       c   5h   8o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
choc2h4cho  29/05/06      c   4h   6o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.10402323E+02 0.20059148E-01-0.69339849E-05 0.11205451E-08-0.69795613E-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
choch2cho  29/05/06       c   3h   4o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66132860E+01 0.17330676E-01-0.64569190E-05 0.10991807E-08-0.70885829E-13    2
-0.36948453E+05-0.33510857E+01-0.24527216E-02 0.37944417E-01-0.31319421E-04    3
 0.14728886E-07-0.28633363E-11-0.35201020E+05 0.30321207E+02                   4
c7h15co  29/05/06         c   8h  15o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.11285434E+02 0.52986119E-01-0.18438002E-04 0.29914826E-08-0.18657219E-12    2
-0.23128758E+05-0.19043266E+02 0.46477064E+00 0.91447301E-01-0.62236912E-04    3
 0.21013266E-07-0.20767316E-11-0.21066465E+05 0.33606785E+02                   4
c6h13co  29/05/06         c   7h  13o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.96649866E+01 0.46393119E-01-0.16063821E-04 0.25950120E-08-0.16124495E-12    2
-0.19778732E+05-0.12396614E+02 0.58405828E+00 0.80256075E-01-0.56858960E-04    3
 0.21278636E-07-0.28550747E-11-0.18163043E+05 0.31312418E+02                   4
c6h13cho  29/05/06        c   7h  14o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.735312165E+01 0.54585181E-01-0.20666961E-04 0.35586569E-08-0.23136422E-12    2
-0.36979836E+05-0.17712097E+01 0.29812413E+00 0.81215702E-01-0.48444803E-04    3
 0.10164990E-07 0.13155567E-11-0.35941781E+05 0.31632582E+02                   4
c5h11co  29/05/06         c   6h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.79615369E+01 0.39962973E-01-0.13805225E-04 0.22294031E-08-0.13865002E-12    2
-0.16395926E+05-0.52926483E+01 0.84059912E+00 0.68129607E-01-0.49279290E-04    3
 0.19393200E-07-0.28888231E-11-0.15274533E+05 0.28433727E+02                   4
c5h11cho  29/05/06        c   6h  12o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.574021210E+01 0.48000779E-01-0.18322138E-04 0.31731002E-08-0.20713903E-12    2
-0.33634195E+05 0.48293533E+01 0.36270306E+00 0.70419297E-01-0.44055785E-04    3
 0.11459334E-07 0.15832497E-12-0.33032711E+05 0.29570734E+02                   4
choch2cho 23/05/06        c   3h   4o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66132860E+01 0.17330676E-01-0.64569190E-05 0.10991807E-08-0.70885829E-13    2
-0.36948453E+05-0.33510857E+01-0.24527216E-02 0.37944417E-01-0.31319421E-04    3
 0.14728886E-07-0.28633363E-11-0.35201020E+05 0.30321207E+02                   4
!*********************************************************************************
cocho     10/11/99        c   2h   1o   2   0g   300.000  5000.000 1399.000    1
 9.41097680e+00 2.85478756e-03-1.03981117e-06 1.68354991e-10-1.00574565e-14    2
-1.06556221e+04-2.20413200e+01 2.12687538e+00 2.12284274e-02-1.86092864e-05    3
 7.71550323e-09-1.23665007e-12-8.32273313e+03 1.64962525e+01                   4
ar                  120186ar  1                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02500000e+02 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00    2
-0.07453750e+04 0.04366001e+02 0.02500000e+02 0.00000000e+00 0.00000000e+00    3
 0.00000000e+00 0.00000000e+00-0.07453750e+04 0.04366001e+02                   4
n2                  121286n   2                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02926640e+02 0.01487977e-01-0.05684761e-05 0.01009704e-08-0.06753351e-13    2
-0.09227977e+04 0.05980528e+02 0.03298677e+02 0.01408240e-01-0.03963222e-04    3
 0.05641515e-07-0.02444855e-10-0.01020900e+05 0.03950372e+02                   4
h                   120186h   1                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02500000e+02 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.00000000e+00    2
 0.02547163e+06-0.04601176e+01 0.02500000e+02 0.00000000e+00 0.00000000e+00    3
 0.00000000e+00 0.00000000e+00 0.02547163e+06-0.04601176e+01                   4
h2                  121286h   2                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02991423e+02 0.07000644e-02-0.05633829e-06-0.09231578e-10 0.01582752e-13    2
-0.08350340e+04-0.01355110e+02 0.03298124e+02 0.08249442e-02-0.08143015e-05    3
-0.09475434e-09 0.04134872e-11-0.01012521e+05-0.03294094e+02                   4
o                   121286o   1                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02542060e+02-0.02755062e-03-0.03102803e-07 0.04551067e-10-0.04368052e-14    2
 0.02923080e+06 0.04920308e+02 0.02946429e+02-0.01638166e-01 0.02421032e-04    3
-0.01602843e-07 0.03890696e-11 0.02914764e+06 0.02963995e+02                   4
o2                  121386o   2                g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.03697578e+02 0.06135197e-02-0.01258842e-05 0.01775281e-09-0.01136435e-13    2
-0.01233930e+05 0.03189166e+02 0.03212936e+02 0.01127486e-01-0.05756150e-05    3
 0.01313877e-07-0.08768554e-11-0.01005249e+05 0.06034738e+02                   4
oh          8/12/99 thermh   1o   1    0   0g   300.000  5000.000 1357.000   01
 2.62599754e+00 1.31992406e-03-3.59724670e-07 4.25630800e-11-1.82048016e-15    2
 4.12085374e+03 7.10667307e+00 3.43586219e+00 2.02235804e-04-1.13546412e-07    3
 2.42445149e-10-7.43651031e-14 3.74321252e+03 2.45014127e+00                   4
!oh  Burcat 22/02/10      h   1o   1    0   0g   300.000  5000.000 1357.000   01
! 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
h2o                 20387h    2o   1    0   g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02672146e+02 0.03056293e-01-0.08730260e-05 0.01200996e-08-0.06391618e-13    2
-0.02989921e+06 0.06862817e+02 0.03386842e+02 0.03474982e-01-0.06354696e-04    3
 0.06968581e-07-0.02506588e-10-0.03020811e+06 0.02590233e+02                   4
co                  121286c   1o   1          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.03025078e+02 0.01442689e-01-0.05630828e-05 0.01018581e-08-0.06910952e-13    2
-0.01426835e+06 0.06108218e+02 0.03262452e+02 0.01511941e-01-0.03881755e-04    3
 0.05581944e-07-0.02474951e-10-0.01431054e+06 0.04848897e+02                   4
hco                 121286h   1c   1o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.03557271e+02 0.03345573e-01-0.01335006e-04 0.02470573e-08-0.01713851e-12    2
 0.03916324e+05 0.05552299e+02 0.02898330e+02 0.06199147e-01-0.09623084e-04    3
 0.01089825e-06-0.04574885e-10 0.04159922e+05 0.08983614e+02                   4
co2                 121286c   1o   2          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.04453623e+02 0.03140169e-01-0.01278411e-04 0.02393997e-08-0.01669033e-12    2
-0.04896696e+06-0.09553959e+01 0.02275725e+02 0.09922072e-01-0.01040911e-03    3
 0.06866687e-07-0.02117280e-10-0.04837314e+06 0.01018849e+03                   4
ch3                 121286c   1h   3          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02844052e+02 0.06137974e-01-0.02230345e-04 0.03785161e-08-0.02452159e-12    2
 0.01643781e+06 0.05452697e+02 0.02430443e+02 0.01112410e+00-0.01680220e-03    3
 0.01621829e-06-0.05864953e-10 0.01642378e+06 0.06789794e+02                   4
ch4                 121286c   1h   4          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.01683479e+02 0.01023724e+00-0.03875129e-04 0.06785585e-08-0.04503423e-12    2
-0.01008079e+06 0.09623395e+02 0.07787415e+01 0.01747668e+00-0.02783409e-03    3
 0.03049708e-06-0.01223931e-09-0.09825229e+05 0.01372219e+03                   4
ho2x      8/12/99 thermh   1o   2    0   0g   300.000  5000.000 1390.000   01
 4.10547423e+00 2.38452835e-03-8.06347989e-07 1.24191723e-10-7.16400108e-15    2
 3.98127689e+02 3.12515836e+00 3.18310656e+00 3.66767950e-03-9.32385122e-07    3
-3.25852919e-10 1.51139912e-13 8.09181013e+02 8.39371099e+00                   4
ho2       8/12/99 thermh   1o   2    0   0g   300.000  5000.000 1390.000   01
 4.10547423e+00 2.38452835e-03-8.06347989e-07 1.24191723e-10-7.16400108e-15    2
 3.98127689e+02 3.12515836e+00 3.18310656e+00 3.66767950e-03-9.32385122e-07    3
-3.25852919e-10 1.51139912e-13 8.09181013e+02 8.39371099e+00                   4
!ho2  Burcat    22/02/10 h   1o   2    0   0g   300.000  5000.000 1390.000   01
! 0.41722659E+01 0.18812098E-02-0.34629297E-06 0.19468516E-10 0.17609153E-15    2
! 0.61818851E+02 0.29577974E+01 0.43017880E+01-0.47490201E-02 0.21157953E-04    3
!-0.24275961E-07 0.92920670E-11 0.29480876E+03 0.37167010E+01 0.15096500E+04    4
h2o2x               120186h   2o   2          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.04573167e+02 0.04336136e-01-0.01474689e-04 0.02348904e-08-0.01431654e-12    2
-0.01800696e+06 0.05011370e+01 0.03388754e+02 0.06569226e-01-0.01485013e-05    3
-0.04625806e-07 0.02471515e-10-0.01766315e+06 0.06785363e+02                   4
h2o2                120186h   2o   2          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.04573167e+02 0.04336136e-01-0.01474689e-04 0.02348904e-08-0.01431654e-12    2
-0.01800696e+06 0.05011370e+01 0.03388754e+02 0.06569226e-01-0.01485013e-05    3
-0.04625806e-07 0.02471515e-10-0.01766315e+06 0.06785363e+02                   4
!h2o2  Burcat  22/02/10  h   2o   2          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
! 4.57977305E+00 4.05326003E-03-1.29844730E-06 1.98211400E-10-1.13968792E-14    2
!-1.80071775E+04 6.64970694E-01 4.31515149E+00-8.47390622E-04 1.76404323E-05    3
!-2.26762944E-08 9.08950158E-12-1.77067437E+04 3.27373319E+00-1.63425145E+04    4
ch2o                121286c   1h   2o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02995606e+02 0.06681321e-01-0.02628955e-04 0.04737153e-08-0.03212517e-12    2
-0.01532037e+06 0.06912572e+02 0.01652731e+02 0.01263144e+00-0.01888168e-03    3
 0.02050031e-06-0.08413237e-10-0.01486540e+06 0.01378482e+03                   4
ch3o                121686c   1h   3o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.03770800e+02 0.07871497e-01-0.02656384e-04 0.03944431e-08-0.02112616e-12    2
 0.01278325e+04 0.02929575e+02 0.02106204e+02 0.07216595e-01 0.05338472e-04    3
-0.07377636e-07 0.02075611e-10 0.09786011e+04 0.01315218e+03                   4
c2h6       1/14/95 thermc   2h   6    0   0g   300.000  5000.000 1384.000   11
 6.10683385e+00 1.29236361e-02-4.42527196e-06 6.87391726e-10-3.98901732e-14    2
-1.37500014e+04-1.30081250e+01-2.52854344e-02 2.40764754e-02-1.11893472e-05    3
 2.08340901e-09-5.29868616e-14-1.12345534e+04 2.11648750e+01                   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
ch2                 120186c   1h   2          g  0250.00   4000.00  1000.00    1
 0.03636408e+02 0.01933057e-01-0.01687016e-05-0.01009899e-08 0.01808256e-12    2
 0.04534134e+06 0.02156561e+02 0.03762237e+02 0.01159819e-01 0.02489585e-05    3
 0.08800836e-08-0.07332435e-11 0.04536791e+06 0.01712578e+02                   4
ch                  121286c   1h   1          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.02196223e+02 0.02340381e-01-0.07058201e-05 0.09007582e-09-0.03855040e-13    2
 0.07086723e+06 0.09178373e+02 0.03200202e+02 0.02072876e-01-0.05134431e-04    3
 0.05733890e-07-0.01955533e-10 0.07045259e+06 0.03331588e+02                   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 0.24999580E+01 0.80860004E-04-0.26977003E-06    3
 0.30407004E-09-0.11066002E-12 0.85458800E+05 0.47530000E+01                   4
c2h                   81193c   2h   1          g  0300.00   4000.00  1000.00    1
 0.03986367e+02 0.03143123e-01-0.01267243e-04 0.02924363e-08-0.02716320e-12    2
 0.06655884e+06 0.01191063e+02 0.02737704e+02 0.08048446e-01-0.09244310e-04    3
 0.06525259e-07-0.01933956e-10 0.06683813e+06 0.07300220e+02                   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
c2h2                  121386c   2h   2          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.04436770e+02 0.05376039e-01-0.01912817e-04 0.03286379e-08-0.02156710e-12    2
 0.02566766e+06-0.02800338e+02 0.02013562e+02 0.01519045e+00-0.01616319e-03    3
 0.09078992e-07-0.01912764e-10 0.02612444e+06 0.08805378e+02                   4
c2h3                  12787c    2h   3          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.05933468e+02 0.04017746e-01-0.03966740e-05-0.01441267e-08 0.02378644e-12    2
 0.03185435e+06-0.08530313e+02 0.02459276e+02 0.07371476e-01 0.02109873e-04    3
-0.01321642e-07-0.01184784e-10 0.03335225e+06 0.01155620e+03                   4
ch3oh                 121686c   1h   4o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.04029061e+02 0.09376593e-01-0.03050254e-04 0.04358793e-08-0.02224723e-12    2
-0.02615791e+06 0.02378196e+02 0.02660115e+02 0.07341508e-01 0.07170051e-04    3
-0.08793194e-07 0.02390570e-10-0.02535348e+06 0.01123263e+03                   4
ch2oh                 120186h   3c   1o   1    g  0250.00   4000.00  1000.00    1
 0.06327520e+02 0.03608271e-01-0.03201547e-05-0.01938750e-08 0.03509705e-12    2
-0.04474509e+05-0.08329366e+02 0.02862628e+02 0.01001527e+00-0.05285436e-05    3
-0.05138540e-07 0.02246041e-10-0.03349679e+05 0.01039794e+03                   4
ch2co                 121686c   2h   2o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.06038817e+02 0.05804840e-01-0.01920954e-04 0.02794485e-08-0.01458868e-12    2
-0.08583402e+05-0.07657581e+02 0.02974971e+02 0.01211871e+00-0.02345046e-04    3
-0.06466685e-07 0.03905649e-10-0.07632637e+05 0.08673553e+02                   4
hcco                  32387h   1c   2o   1    g  0300.00   4000.00  1000.00    1
 0.06758073e+02 0.02000400e-01-0.02027607e-05-0.01041132e-08 0.01965165e-12    2
 0.01901513e+06-0.09071262e+02 0.05047965e+02 0.04453478e-01 0.02268283e-05    3
-0.01482095e-07 0.02250742e-11 0.01965892e+06 0.04818439e+01                   4
c2h5oh      3/12/95 thermc   2h   6o   1   0g   300.000  5000.000 1391.000   11
 7.95264841e+00 1.31574144e-02-4.43693359e-06 6.82201160e-10-3.93096335e-14    2
-3.23602958e+04-1.76537972e+01 4.23149045e-01 2.92858167e-02-1.73845099e-05    3
 5.33639892e-09-6.74917252e-13-2.95683054e+04 2.33538763e+01                   4
pc2h4oh     3/12/95 thermc   2h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1391.00    1
 7.52241939e+00 1.10492715e-02-3.72257465e-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
sc2h4oh     3/12/95 thermc   2h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1553.00    1
 7.26631179e+00 1.09588926e-02-3.63662803e-06 5.53659830e-10-3.17012322e-14    2
-8.64310684e+03-1.06794104e+01 1.83974631e+00 1.87789371e-02-4.60544253e-06    3
-2.13116990e-09 9.43772653e-13-6.29595195e+03 2.01446141e+01                   4
ch3co                 120186c   2h   3o   1    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.05612279e+02 0.08449886e-01-0.02854147e-04 0.04238376e-08-0.02268404e-12    2
-0.05187863e+05-0.03274949e+02 0.03125278e+02 0.09778220e-01 0.04521448e-04    3
-0.09009462e-07 0.03193718e-10-0.04108508e+05 0.01122885e+03                   4
ch2cho              1103930c   1h   3c   2    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.05975670e+02 0.08130591e-01-0.02743624e-04 0.04070304e-08-0.02176017e-12    2
 0.04903218e+04-0.05045251e+02 0.03409062e+02 0.01073857e+00 0.01891492e-04    3
-0.07158583e-07 0.02867385e-10 0.01521477e+05 0.09558290e+02                   4
ch3cho                120186c   2o   1h   4    g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.05868650e+02 0.01079424e+00-0.03645530e-04 0.05412912e-08-0.02896844e-12    2
-0.02264569e+06-0.06012946e+02 0.02505695e+02 0.01336991e+00 0.04671953e-04    3
-0.01128140e-06 0.04263566e-10-0.02124589e+06 0.01335089e+03                   4
c3h4-a              101993h   4c   3          g  0300.00   4000.00  1400.00    1
 0.09776256e+02 0.05302138e-01-0.03701118e-05-0.03026386e-08 0.05089581e-12    2
 0.01954972e+06-0.03077061e+03 0.02539831e+02 0.01633437e+00-0.01764950e-04    3
-0.04647365e-07 0.01729131e-10 0.02251243e+06 0.09935702e+02                   4
c3h4-p              101993h   4c   3          g  0300.00   4000.00  1400.00    1
 0.09768102e+02 0.05219151e-01-0.03753140e-05-0.02992191e-08 0.05107878e-12    2
 0.01860277e+06-0.03020678e+03 0.03029730e+02 0.01498961e+00-0.01398500e-04    3
-0.03969619e-07 0.01388217e-10 0.02148408e+06 0.08004594e+02                   4
c3h6       5/27/97 thermc   3h   6    0   0g   300.000  5000.000 1388.000   11
 8.01595958e+00 1.37023634e-02-4.66249733e-06 7.21254402e-10-4.17370126e-14    2
-1.87821271e+03-2.00160668e+01 3.94615444e-01 2.89107662e-02-1.54886808e-05    3
 3.88814209e-09-3.37890352e-13 1.06688164e+03 2.19003736e+01                   4
!c4h6                 120186c   4h   6          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
! 0.08046583e+02 0.01648525e+00-0.05522227e-04 0.08123593e-08-0.04295078e-12    2
```

```
! 0.01370130e+06-0.01800458e+03 0.03197108e+02 0.02025592e+00 0.06510192e-04    3
!-0.01658442e-06 0.06400282e-10 0.01571520e+06 0.09895660e+02                   4
c4h6   thergas          c   4h   6          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.68674841E+01 0.19524431E-01-0.71655500E-05 0.12063879E-08-0.77169533E-13    2
 0.10055352E+05-0.12039730E+02-0.96653026E+00 0.43890834E-01-0.30594703E-04    3
 0.75114208E-08 0.49782910E-12 0.11824623E+05 0.27178473E+02                   4
nc3h7                120186c   3h   7          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.07978291e+02 0.01576113e+00-0.05173243e-04 0.07443892e-08-0.03824978e-12    2
 0.07579402e+05-0.01935611e+03 0.01922537e+02 0.02478927e+00 0.01810249e-04    3
-0.01783266e-06 0.08582996e-10 0.09713281e+05 0.01399271e+03                   4
ic3h7                120186c   3h   7          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.08063369e+02 0.01574488e+00-0.05182392e-04 0.07477245e-08-0.03854422e-12    2
 0.05313871e+05-0.02192647e+03 0.01713300e+02 0.02542616e+00 0.01580808e-04    3
-0.01821286e-06 0.08827710e-10 0.07535809e+05 0.01297901e+03                   4
c3h8                 120186c   3h   8          g  0300.00   5000.00  1000.00    1
 0.07525217e+02 0.01889034e+00-0.06283924e-04 0.09179373e-08-0.04812410e-12    2
-0.01646455e+06-0.01784390e+03 0.08969208e+01 0.02668986e+00 0.05431425e-04    3
-0.02126001e-06 0.09243330e-10-0.01395492e+06 0.01935533e+03                   4
ic4h7       5/27/97 thermc   4h   7    0   0g   300.000  5000.000 1393.000   11
 1.16382753e+01 1.57681298e-02-5.38538858e-06 8.35172927e-10-4.84141083e-14    2
 1.05471642e+04-3.90259890e+01-7.20881697e-04 4.36495730e-02-3.16385877e-05    3
 1.23984983e-08-2.04378360e-12 1.45717785e+04 2.33234340e+01                   4
ic4h8       5/27/97 thermc   4h   8    0   0g   300.000  5000.000 1388.000   21
 1.12258330e+01 1.81795798e-02-6.20348592e-06 9.61444458e-10-5.57088057e-14    2
-7.69983777e+03-3.73306704e+01 9.38433173e-01 3.90547287e-02-2.16437148e-05    3
 5.87267077e-09-6.14435479e-13-3.74817891e+03 1.91442985e+01                   4
c4h7        2/14/95 thermc   4h   7    0   0g   300.000  5000.000 1392.000   11
 1.12103578e+01 1.60483196e-02-5.46502292e-06 8.45941053e-10-4.89772739e-14    2
 1.09041937e+04-3.55593015e+01-3.50508352e-01 4.26511243e-02-2.90979373e-05    3
 1.05403914e-08-1.60059854e-12 1.49933591e+04 2.67295696e+01                   4
!c4h8-1      4/ 7/97 thermc   4h   8    0   0g   300.000  5000.000 1392.000   21
! 1.13508668e+01 1.80617877e-02-6.16093029e-06 9.54652959e-10-5.53089641e-14    2
!-5.97871038e+03-3.64369438e+01-8.31372089e-06 4.52580978e-02-2.93658559e-05    3
! 1.00220436e-08-1.43191680e-12-1.57875035e+03 2.95084236e+01                   4
c4h8-1     thergas       c   4h   8    0   0g   300.000  5000.000 1392.000   21
 0.92259016E+01 0.20003740E-01-0.66492503E-05 0.10443505E-08-0.63680892E-13    2
-0.46350801E+04-0.23845947E+02-0.32336560E+00 0.41923333E-01-0.22391139E-04    3
 0.38603827E-08 0.48055418E-12-0.16111676E+04 0.26994673E+02                   4
c4h8-2      4/ 7/97 thermc   4h   8    0   0g   300.000  5000.000 1384.000   21
 1.07864376e+01 1.84629194e-02-6.28289490e-06 9.72052191e-10-5.62579166e-14    2
-7.33793717e+03-3.44892763e+01 6.69213599e-01 3.76839941e-02-1.85689683e-05    3
 3.69571062e-09-1.03095209e-13-3.33819338e+03 2.14868169e+01                   4
sc4h9       1/14/95 thermc   4h   9    0   0g   300.000  5000.000 1373.000   31
 1.18293992e+01 1.94203812e-02-6.55835141e-06 1.00989031e-09-5.82693176e-14    2
 1.79315973e+03-3.68210535e+01 7.70280143e-01 3.86280904e-02-1.57100260e-05    3
 7.16860109e-10 7.00801288e-13 6.28812837e+03 2.49106489e+01                   4
pc4h9                     c   4h   9   00   0G   300.00   5000.000 1000.000    1
 0.12736644E+02 0.16577536E-01-0.44344897E-05 0.59793753E-09-0.32939665E-13    2
 0.35031621E+04-0.41310871E+02-0.11734563E+01 0.55818956E-01-0.51105064E-04    3
 0.29930241E-07-0.80191687E-11 0.76135786E+04 0.31089687E+02                   4
!pc4h9                    c   4h   90   00   0G   300.00   5000.000 1000.000    1
! 0.90049105E+01 0.24003319E-01-0.89551868E-05 0.15322594E-08-0.98247040E-13    2
! 0.34630112E+04-0.20525192E+02 0.21864157E+01 0.33004966E-01 0.30301208E-05    3
!-0.24040720E-07 0.11306377E-10 0.58979180E+04 0.17254166E+02                   4
sc4h9                     c   4h   90   00   0G   300.00   5000.000 1000.000    1
 0.94282923E+01 0.21911845E-01-0.72831863E-05 0.10622090E-08-0.55580591E-13    2
 0.36300923E+04-0.22419800E+02 0.69567555E+00 0.33100396E-01 0.63189173E-05    3
-0.27052078E-07 0.12000780E-10 0.68517148E+04 0.26270721E+02                   4
nc4h10                    c   4h   100   00   0G   300.00   5000.00  1000.00    1
 0.10526500E+02 0.23627250E-01-0.78760100E-05 0.11502000E-08-0.60250000E-13    2
-0.20519300E+05-0.32140000E+02 0.15223400E+01 0.34286840E-01 0.81006600E-05    3
-0.29214870E-07 0.12672840E-10-0.17125800E+05 0.18349000E+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
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
c6h7c                     c   6h   7    0   0G   300.00   5000.000 1000.000    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
c6h9                      c   6h   90   00   0G   300.00   5000.000 1000.000    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 0.39808900E-11 0.23327010E+05 0.35656570E+02                   4
```

```
c6h10                 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
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
c5h5o13               c   5h   5o   1   0G   200.00   6000.00  1000.00     1
 0.12606535E+02 0.16747067E-01-0.61097587E-05 0.99674576E-09-0.60111834E-13    2
 0.14114657E+04-0.42604911E+02 0.23043601E+00 0.32322572E-01 0.28900908E-04    3
-0.70680613E-07 0.33407174E-10 0.5555424E+04 0.25330946E+02                   4
cpd                   c   5h   6   0   0G   200.00   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
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
c5h4o CY              c   5h   4o   10   0G   300.000  5000.000  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
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
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 0.40833220E+05-0.10651440E+02                   4
c4h                   c   4h   10   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.06242882E+02 0.06193662E-01-0.02088591E-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
h2c4o                 h   2c   4o   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
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
c4h8                  c   4h   80   00   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.20535840E+01 0.34350500E-01-0.15883196E-04 0.33089660E-08-0.25361040E-12    2
-0.21397230E+04 0.15543201E+02 0.18111380E+01 0.30853380E-01 0.50865240E-05    3
-0.24654880E-07 0.11110192E-10-0.17904000E+04 0.21062470E+02                   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
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
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
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
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
meall                 c   4h   7   00   0G   300.00   3000.00  1000.00     1
 0.5521420E+01  0.268384E-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
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
c3h4oh                c   3h   5o   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 0.91500000E+00 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.74540000E+03 0.91500000E+00                   4
c3h3o                 c   3h   3o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.13887620E+02 0.29359982E-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
c3h4o                 c   3h   4o   10   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.77646680E+01 0.12994840E-01-0.50390130E-05 0.91935780E-09-0.63330310E-13    2
-0.11632440E+05-0.15585760E+02 0.20826950E+01 0.20472490E-01 0.61341880E-05    3
-0.22729730E-07 0.10616880E-10-0.96374620E+04 0.15812640E+02                   4
c3h4o2h               c   3h   5o   20   0G   300.00   5000.00  1000.00     1
 0.10273430E+02 0.20794330E-01-0.81044830E-05 0.14819580E-08-0.10219510E-12    2
 0.22499800E+04-0.27731380E+02 0.16315440E+01 0.29607480E-01 0.17006520E-04    3
-0.43282540E-07 0.19380030E-10 0.54096350E+04 0.20646920E+02                   4
c2h2oh                h   3c   2o   1   0G   300.000  3000.000 1000.00     1
 0.5720684E+01 0.10704185E-01-0.50358494E-05 0.1132449 9E-08-0.10086621E-12    2
 0.12849424E+05-0.47081776E+01 0.81498282E-01 0.31640644E-01-0.34085361E-04    3
 0.18978838E-07-0.41950165E-11 0.14060783E+05 0.22908977E+02                   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 3.89946532E+00 9.70107503E-03-3.11930933E-07    3
-5.53773250E-09 2.46573248E-12 8.70119043E+03 4.49187470E+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
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
cocho     10/11/99      c   2h   1o   2   0g   300.000  5000.000 1399.000    11
 9.41097680e+00 2.85478756e-03-1.03981117e-06 1.68354991e-10-1.00574565e-14    2
-1.06556221e+04-2.20413200e+01 2.12687538e+00 2.12284274e-02-1.86092864e-05    3
 7.71550323e-09-1.23665007e-12-8.32273313e+03 1.64962525e+01                   4
mhx       22/03/07      c   7h  14o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.53440037E+01 0.79992868E-01-0.33390181E-04 0.61545120E-08-0.41967959E-12    2
-0.58716285E+05 0.72200592E+02-0.18160734E+01 0.97855628E-01-0.69199086E-04    3
 0.18872266E-07 0.11615925E-11-0.62734984E+05 0.42237640E+02                   4
mhx6j     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.15547460E+01 0.69381967E-01-0.27211119E-04 0.48027240E-08-0.31770512E-12    2
-0.35083844E+05 0.54057785E+02-0.26617866E+01 0.10671473E+00-0.96865195E-04    3
 0.45221036E-07-0.73678659E-11-0.38119703E+05 0.47488998E+02                   4
mhx5j     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.21214292E+01 0.69813929E-01-0.27338685E-04 0.48197282E-08-0.31855570E-12    2
-0.35976840E+05 0.57395653E+02-0.18290673E+01 0.10174777E+00-0.88733104E-04    3
 0.39217596E-07-0.55968446E-11-0.39315125E+05 0.43993084E+02                   4
mhx4j     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.17911706E+01 0.69144681E-01-0.26982223E-04 0.47451421E-08-0.31307652E-12    2
-0.36052289E+05 0.55685452E+02-0.29007969E+01 0.10933183E+00-0.10578186E-03    3
 0.54886215E-07-0.10785092E-10-0.39210559E+05 0.48467461E+02                   4
mhx3j     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.17911706E+01 0.69144681E-01-0.26982223E-04 0.47451421E-08-0.31307652E-12    2
-0.36052289E+05 0.55685452E+02-0.29007969E+01 0.10933183E+00-0.10578186E-03    3
 0.54886215E-07-0.10785092E-10-0.39210559E+05 0.48467461E+02                   4
mhx2j     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.21564429E+01 0.70959538E-01-0.28091928E-04 0.49890776E-08-0.33138320E-12    2
-0.39265750E+05 0.54841595E+02-0.24114866E+01 0.10482028E+00-0.92153634E-04    3
 0.41186592E-07-0.61446178E-11-0.42473910E+05 0.44160961E+02                   4
mhxmj     22/03/07      c   7h  13o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.15547460E+01 0.69381967E-01-0.27211119E-04 0.48027240E-08-0.31770512E-12    2
-0.35436105E+05 0.54057785E+02-0.26617866E+01 0.10671473E+00-0.96865195E-04    3
 0.45221036E-07-0.73678659E-11-0.38471965E+05 0.47488998E+02                   4
```

```
mhx2d     22/03/07      c   7h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.30670664E+01 0.69289863E-01-0.28475295E-04 0.51915974E-08-0.35129205E-12    2
-0.46052621E+05 0.59812164E+02-0.11643432E+01 0.87207720E-01-0.61724080E-04    3
 0.17676518E-07 0.49939913E-12-0.49122711E+05 0.41000835E+02                   4
mhx3d     22/03/07      c   7h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.41019386E+02-0.72655748E-02 0.91848387E-05-0.24325599E-08 0.20354227E-12    2
-0.63472555E+05-0.18454082E+03 0.72920524E-01 0.63392982E-01-0.22414801E-04    3
-0.75199867E-10 0.28531133E-13-0.47876488E+05 0.42706577E+02                   4
mhx4d     22/03/07      c   7h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.85239124E+01 0.50659709E-01-0.19203690E-04 0.33090852E-08-0.21522636E-12    2
-0.50278719E+05-0.51729507E+01 0.40506089E+00 0.81671998E-01-0.51622384E-04    3
 0.10907571E-07 0.16636306E-11-0.49135172E+05 0.33104610E+02                   4
mhx5d     22/03/07      c   7h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.39540703E+01 0.72504982E-01-0.30471969E-04 0.56443858E-08-0.38628706E-12    2
-0.43972320E+05 0.64749664E+02-0.12938293E+01 0.90416260E-01-0.63824511E-04    3
 0.16181136E-07 0.17447221E-11-0.47531074E+05 0.41093353E+02                   4
mhx6oo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.48035598E+00 0.73805049E-01-0.29052746E-04 0.51397735E-08-0.34049391E-12    2
-0.52742852E+05 0.48489410E+02-0.10189101E+01 0.10914572E+00-0.85215754E-04    3
 0.27255975E-07-0.21548476E-12 0.55746973E+05 0.44183495E+02                   4
mhx5oo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.36547837E+01 0.81443414E-01-0.33055021E-04 0.59745329E-08-0.40182023E-12    2
-0.53581617E+05 0.71031219E+02-0.15692945E+01 0.11390071E+00-0.92900707E-04    3
 0.31712023E-07-0.93690149E-12-0.58274551E+05 0.45645321E+02                   4
mhx4oo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.36547837E+01 0.81443414E-01-0.33055021E-04 0.59745329E-08-0.40182023E-12    2
-0.53310023E+05 0.71029549E+02-0.14946394E+01 0.11338593E+00-0.91672067E-04    3
 0.30493243E-07-0.50802418E-12-0.58010844E+05 0.45327457E+02                   4
mhx3oo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.36547837E+01 0.81443414E-01-0.33055021E-04 0.59745329E-08-0.40182023E-12    2
-0.53310023E+05 0.71029549E+02-0.14946394E+01 0.11338593E+00-0.91672067E-04    3
 0.30493243E-07-0.50802418E-12-0.58010844E+05 0.45327457E+02                   4
mhx2oo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.39607212E+02 0.12813042E-01-0.22923591E-05 0.22323871E-09-0.95685102E-14    2
-0.70326188E+05-0.17283467E+03-0.18774533E+00 0.10238648E+00-0.69645561E-04    3
 0.19281824E-07-0.14959206E-11-0.57334262E+05 0.40181046E+02                   4
mhxmoo    22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.19024690E+01 0.70248246E-01-0.27077314E-04 0.47207451E-08-0.30956680E-12    2
-0.56802234E+05 0.39446655E+02-0.45669231E+01 0.12060383E+00-0.97684351E-04    3
 0.31225948E-07-0.16206546E-12-0.58630758E+05 0.60211632E+02                   4
mhx6ooh5j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15477729E+01 0.70818469E-01-0.27357068E-04 0.47767301E-08-0.31356368E-12    2
-0.47002523E+05 0.46255531E+02-0.10935181E+01 0.11895448E+00-0.11640465E-03    3
 0.58947776E-07-0.10982948E-10-0.50155598E+05 0.45499027E+02                   4
mhx6ooh4j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15477729E+01 0.70818469E-01-0.27357068E-04 0.47767301E-08-0.31356368E-12    2
-0.47002523E+05 0.46255531E+02-0.10935181E+01 0.11895448E+00-0.11640465E-03    3
 0.58947776E-07-0.10982948E-10-0.50155598E+05 0.45499027E+02                   4
mhx6ooh3j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15477729E+01 0.70818469E-01-0.27357068E-04 0.47767301E-08-0.31356368E-12    2
-0.47002523E+05 0.46255531E+02-0.10935181E+01 0.11895448E+00-0.11640465E-03    3
 0.58947776E-07-0.10982948E-10-0.50155598E+05 0.45499027E+02                   4
mhx5ooh6j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.22733004E+01 0.78512855E-01-0.31453317E-04 0.56336895E-08-0.37649517E-12    2
-0.47249234E+05 0.67447754E+02-0.11907830E+01 0.11959900E+00-0.11156968E-03    3
 0.50130062E-07-0.70070356E-11-0.51967359E+05 0.45767536E+02                   4
mhx5ooh4j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.24697282E+01 0.78194670E-01-0.31170519E-04 0.55625149E-08-0.37071580E-12    2
-0.47879695E+05 0.68857536E+02-0.14738430E+01 0.12252140E+00-0.12121833E-03    3
 0.60523973E-07-0.10681401E-10-0.52701234E+05 0.46932564E+02                   4
mhx5ooh3j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.24697282E+01 0.78194670E-01-0.31170519E-04 0.55625149E-08-0.37071580E-12    2
-0.47879695E+05 0.68857536E+02-0.14738430E+01 0.12252140E+00-0.12121833E-03    3
 0.60523973E-07-0.10681401E-10-0.52701234E+05 0.46932564E+02                   4
mhx5ooh2j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.30494864E+01 0.80421060E-01-0.32541480E-04 0.58707568E-08-0.39440093E-12    2
-0.51011984E+05 0.69246597E+02-0.98423606E+00 0.11802917E+00-0.10766526E-03    3
 0.46918952E-07-0.60795986E-11-0.55965043E+05 0.42672707E+02                   4
mhx4ooh6j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.22733004E+01 0.78512855E-01-0.31453317E-04 0.56336895E-08-0.37649517E-12    2
-0.46625242E+05 0.66754659E+02-0.11907830E+01 0.11959900E+00-0.11156968E-03    3
 0.50130062E-07-0.70070356E-11-0.51343363E+05 0.45074451E+02                   4
mhx4ooh5j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28131692E+01 0.78894652E-01-0.31549760E-04 0.56431282E-08-0.37671740E-12    2
-0.47528512E+05 0.69944481E+02-0.39757508E+00 0.11490700E+00-0.10409912E-03    3
 0.44787072E-07-0.54695775E-11-0.52534574E+05 0.41745716E+02                   4
mhx4ooh3j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.24697282E+01 0.78194670E-01-0.31170519E-04 0.55625149E-08-0.37071580E-12    2
```

```
-0.47607957E+05 0.68164452E+02-0.14738430E+01 0.12252140E+00-0.12121833E-03    3
 0.60523973E-07-0.10681401E-10-0.52429496E+05 0.46239479E+02                   4
mhx4ooh2j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.30494864E+01 0.80421060E-01-0.32541480E-04 0.58707568E-08-0.39440093E-12    2
-0.50740332E+05 0.68561981E+02-0.93381542E+00 0.11767731E+00-0.10681507E-03    3
 0.46066106E-07-0.57765875E-11-0.55698668E+05 0.41775089E+02                   4
mhx3ooh6j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.22733004E+01 0.78512855E-01-0.31453317E-04 0.56336895E-08-0.37649517E-12    2
-0.46625242E+05 0.66754669E+02-0.11907830E+01 0.11959900E+00-0.11156968E-03    3
 0.50130062E-07-0.70070356E-11-0.51343363E+05 0.45074451E+02                   4
mhx3ooh5j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.28131692E+01 0.78894652E-01-0.31549760E-04 0.56431282E-08-0.37671740E-12    2
-0.47528512E+05 0.69944481E+02-0.39757508E+00 0.11490700E+00-0.10409912E-03    3
 0.44787072E-07-0.54695775E-11-0.52534574E+05 0.41745716E+02                   4
mhx3ooh4j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.24697282E+01 0.78194670E-01-0.31170519E-04 0.55625149E-08-0.37071580E-12    2
-0.47607957E+05 0.68164452E+02-0.14738430E+01 0.12252140E+00-0.12121833E-03    3
 0.60523973E-07-0.10681401E-10-0.52429496E+05 0.46239479E+02                   4
mhx3ooh2j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.30494864E+01 0.80421060E-01-0.32541480E-04 0.58707568E-08-0.39440093E-12    2
-0.50740453E+05 0.68581360E+02-0.85151672E+00 0.11710868E+00-0.10545355E-03    3
 0.44710966E-07-0.52981647E-11-0.55707508E+05 0.41445934E+02                   4
mhx2ooh5j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.39474049E+02 0.12331413E-01-0.21747981E-05 0.21814056E-09-0.10049084E-13    2
-0.64217438E+05-0.16796841E+03 0.95883274E+00 0.10356646E+00-0.81258710E-04    3
 0.32768106E-07-0.61731800E-11-0.51863312E+05 0.37082970E+02                   4
mhx2ooh4j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.39686264E+02 0.11939522E-01-0.20137472E-05 0.18769640E-09-0.78293754E-14    2
-0.64259086E+05-0.16905768E+03 0.75416207E-01 0.10985699E+00-0.95231175E-04    3
 0.45394987E-07-0.10294122E-10-0.51779055E+05 0.40758095E+02                   4
mhx2ooh3j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.39686264E+02 0.11939522E-01-0.20137472E-05 0.18769640E-09-0.78293754E-14    2
-0.64259086E+05-0.16905768E+03 0.75416207E-01 0.10985699E+00-0.95231175E-04    3
 0.45394987E-07-0.10294122E-10-0.51779055E+05 0.40758095E+02                   4
mhx2oohmj 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40051258E+02 0.11890890E-01-0.20436926E-05 0.19805756E-09-0.87725220E-14    2
-0.63683555E+05-0.17137166E+03 0.19829021E+00 0.10804187E+00-0.88232766E-04    3
 0.37637168E-07-0.75496354E-11-0.51027992E+05 0.40271969E+02                   4
mhxmooh2j 22/03/07      c   7h  13o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.25490456E+01 0.69172017E-01-0.26544933E-04 0.46140456E-08-0.30195662E-12    2
-0.54252070E+05 0.37410927E+02-0.41539311E+01 0.12593223E+00-0.11533715E-03    3
 0.49317968E-07-0.63259324E-11-0.56302980E+05 0.57954033E+02                   4
mhx6ooh5oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.23360072E+00 0.82935162E-01-0.33301883E-04 0.59735150E-08-0.39956599E-12    2
-0.64286523E+05 0.61157417E+02 0.29983729E+00 0.12309225E+00-0.10248620E-03    3
 0.34738843E-07-0.76944283E-12-0.68954430E+05 0.42411652E+02                   4
mhx6ooh4oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50010556E+00 0.83395950E-01-0.33540906E-04 0.60235359E-08-0.40326946E-12    2
-0.64182559E+05 0.62641304E+02 0.22918832E+00 0.12355952E+00-0.10354388E-03    3
 0.35722600E-07-0.10908014E-11-0.68946578E+05 0.42713631E+02                   4
mhx6ooh3oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50010556E+00 0.83395950E-01-0.33540906E-04 0.60235359E-08-0.40326946E-12    2
-0.64182559E+05 0.62641251E+02 0.22918832E+00 0.12355952E+00-0.10354388E-03    3
 0.35722600E-07-0.10908014E-11-0.68946578E+05 0.42713577E+02                   4
mhx5ooh6oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.23360072E+00 0.82935162E-01-0.33301883E-04 0.59735150E-08-0.39956599E-12    2
-0.64286523E+05 0.61157570E+02 0.29983729E+00 0.12309225E+00-0.10248620E-03    3
 0.34738843E-07-0.76944283E-12-0.68954430E+05 0.42411804E+02                   4
mhx5ooh4oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12    2
-0.65131305E+05 0.84404907E+02-0.65638497E-01 0.12657005E+00-0.10712017E-03    3
 0.36169567E-07-0.42798908E-12-0.71501852E+05 0.43780182E+02                   4
mhx5ooh3oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12    2
-0.65131305E+05 0.84404861E+02-0.65638497E-01 0.12657005E+00-0.10712017E-03    3
 0.36169567E-07-0.42798908E-12-0.71501852E+05 0.43780128E+02                   4
mhx5ooh2oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.95003611E+00 0.85323408E-01-0.34745259E-04 0.62956538E-08-0.42421126E-12    2
-0.65858031E+05 0.64791031E+02-0.14032999E+01 0.13062093E+00-0.11098626E-03    3
 0.38399573E-07-0.12351848E-11-0.70503648E+05 0.50246483E+02                   4
mhx4ooh6oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50010556E+00 0.83395950E-01-0.33540906E-04 0.60235359E-08-0.40326946E-12    2
-0.64182559E+05 0.62641342E+02 0.22918832E+00 0.12355952E+00-0.10354388E-03    3
 0.35722600E-07-0.10908014E-11-0.68946578E+05 0.42713669E+02                   4
mhx4ooh5oo 22/03/07     c   7h  13o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12    2
-0.65131406E+05 0.83713699E+02 0.15917646E-02 0.12610377E+00-0.10599983E-03    3
 0.35051123E-07-0.32165344E-13-0.71509047E+05 0.42804531E+02                   4
```

```
mhx4ooh3oo 22/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12     2
-0.64859578E+05 0.83711777E+02-0.65638497E-01 0.12657005E-00-0.10712017E-03     3
 0.36169567E-07-0.42798968E-12-0.71230125E-01 0.43087048E+02                     4
mhx4ooh2oo 22/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11544799E+01 0.85673526E-01-0.34919416E-04 0.63302594E-08-0.42663751E-12     2
-0.65507516E+05 0.65235184E+02-0.12145243E+01 0.12927723E+00-0.10766792E-03     3
 0.34993544E-07 0.33463078E-14-0.70251641E+05 0.48758587E+02                     4
mhx3ooh6oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.50010556E+00 0.83395950E-01-0.33540906E-04 0.60235359E-08-0.40326946E-12     2
-0.64182352E+05 0.62641701E+02 0.10409708E+00 0.12442626E+00-0.10562293E-03     3
 0.37794369E-07-0.18227553E-11-0.68933180E+05 0.43243313E+02                     4
mhx3ooh5oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12     2
-0.65131406E+05 0.83713699E+02 0.15917646E-02 0.12610377E+00-0.10599983E-03     3
 0.35051123E-07-0.32165344E-13-0.71509047E+05 0.42804531E+02                     4
mhx3ooh4oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.43766112E+01 0.90649374E-01-0.37397571E-04 0.68376855E-08-0.46365196E-12     2
-0.64859594E+05 0.83712585E+02-0.50570048E-01 0.12646770E+00-0.10687898E-03     3
 0.35932814E-07-0.34538981E-12-0.71231773E+05 0.43023788E+02                     4
mhx3ooh2oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11544799E+01 0.85673526E-01-0.34919416E-04 0.63302594E-08-0.42663751E-12     2
-0.65507516E+05 0.65235184E+02-0.12145243E+01 0.12927723E+00-0.10766792E-03     3
 0.34993544E-07 0.33463078E-14-0.70251641E+05 0.48758587E+02                     4
mhx2ooh5oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.95003611E+00 0.85323408E-01-0.34745259E-04 0.62956538E-08-0.42421126E-12     2
-0.65858133E+05 0.64792908E+02-0.13379129E+01 0.13016741E+00-0.10989654E-03     3
 0.37311679E-07-0.85015382E-12-0.70510648E+05 0.49971710E+02                     4
mhx2ooh4oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11544799E+01 0.85673526E-01-0.34919416E-04 0.63302594E-08-0.42663751E-12     2
-0.65507352E+05 0.65929504E+02-0.13042477E+01 0.12989435E+00-0.10913773E-03     3
 0.36449077E-07-0.50812983E-12-0.70241961E+05 0.49833183E+02                     4
mhx2ooh3oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11544799E+01 0.85673526E-01-0.34919416E-04 0.63302594E-08-0.42663751E-12     2
-0.65507539E+05 0.65928467E+02-0.11994557E+01 0.12917487E+00-0.10742672E-03     3
 0.34756791E-07 0.85945702E-13-0.70253289E+05 0.49387810E+02                     4
mhx2oohmoo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.46916628E+01 0.73959388E-01-0.28656599E-04 0.50142241E-08-0.32964254E-12     2
-0.69109312E+05 0.32747047E+02-0.43285637E+01 0.13681945E+00-0.11455012E-03     3
 0.36688590E-07-0.24507401E-13-0.70867562E+05 0.64508850E+02                     4
mhxmooh2oo 23/03/07     c   7h  13o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.46916628E+01 0.73959388E-01-0.28656599E-04 0.50142241E-08-0.32964254E-12     2
-0.69109320E+05 0.32746307E+02-0.43175459E+01 0.13673598E+00-0.11433273E-03     3
 0.36456264E-07 0.62504052E-13-0.70868633E+05 0.64462479E+02                     4
hxaoj     22/03/07     c   6h  11o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.25180285E+01 0.61358701E-01-0.24090034E-04 0.42542228E-08-0.28148889E-12     2
-0.33437289E+05 0.52939030E+02-0.12126077E+01 0.80570221E-01-0.56666246E-04     3
 0.14181447E-07 0.17820504E-11-0.36384246E+05 0.37173130E+02                     4
mhx5ooh6*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.93238049E+01 0.94250128E-01-0.41391857E-04 0.79094020E-08-0.55353974E-12     2
-0.78086766E+05 0.10765194E+03 0.15029451E+00 0.11062257E+00-0.86699038E-04     3
 0.24865454E-07 0.17648323E-11-0.85347383E+05 0.42256721E+02                     4
mhx4ooh6*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11303321E+02 0.10038695E-00-0.44588120E-04 0.85882874E-08-0.60449838E-12     2
-0.77235867E+05 0.12861674E+03 0.12129306E+01 0.10844267E+00-0.87228284E-04     3
 0.26916881E-07 0.10951795E-11-0.86315672E+05 0.36266994E+02                     4
mhx3ooh6*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.13070218E+02 0.10027808E+00-0.44536424E-04 0.85790290E-08-0.60394246E-12     2
-0.77256820E+05 0.12828664E+03 0.14278489E+01 0.10698102E+00-0.83792715E-04     3
 0.23564532E-07 0.22548903E-11-0.86339070E+05 0.35352867E+02                     4
mhx6ooh5*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.12911500E+02 0.99025391E-01-0.43643522E-04 0.83600620E-08-0.58608234E-12     2
-0.78220430E+05 0.12745692E+03 0.22684979E+01 0.10212250E+00-0.78704688E-04     3
 0.22415680E-07 0.19388839E-11-0.87280828E+05 0.31714230E+02                     4
mhx4ooh5*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.775220087E+01 0.91262564E-01-0.39736584E-04 0.75468067E-08-0.52582971E-12     2
-0.82382008E+05 0.97632767E+02-0.22479914E+00 0.11087433E+00-0.87604734E-04     3
 0.26884447E-07 0.69710600E-12-0.88838242E+05 0.43205956E+02                     4
mhx3ooh5*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.11681030E+02 0.97600020E-01-0.43039112E-04 0.82489873E-08-0.57860932E-12     2
-0.81479578E+05 0.11997951E+03 0.10870180E+01 0.10698221E+00-0.84059284E-04     3
 0.24903915E-07 0.14432357E-11-0.89833438E+05 0.36851753E+02                     4
mhx2ooh5*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.77641158E+01 0.91284178E-01-0.39751896E-04 0.75510318E-08-0.52621752E-12     2
-0.82377062E+05 0.98392052E+02-0.58246732E-01 0.10971703E+00-0.84822073E-04     3
 0.24106717E-07 0.16794897E-11-0.88856031E+05 0.43194038E+02                     4
mhx6ooh4*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.20812216E+02 0.11319981E+00-0.51411345E-04 0.10060767E-07-0.71634967E-12     2
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.29854617E+05 0.56262314E+02                     4
!!!
mhx2oohm*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.10129391E+02 0.60920179E-01-0.23981849E-04 0.42434487E-08-0.28118426E-12     2
-0.86400406E+05 0.11364975E+01 0.21002100E+01 0.99279583E-01-0.68763889E-04     3
 0.16624403E-07 0.17235636E-11-0.86119766E+05 0.33730564E+02                     4
mhxcy6o3  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.28958994E+02 0.12651365E+00-0.61114522E-04 0.12501499E-07-0.91965910E-12     2
-0.58930633E+05 0.19952661E+03-0.36929026E+01 0.11506915E+00-0.94190698E-04     3
 0.28112556E-07 0.22109489E-11-0.71977969E+05 0.46990864E+02                     4
mhxcy5o2  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.29045643E+02 0.12818998E+00-0.62460931E-04 0.12857120E-07-0.95024054E-12     2
-0.60815547E+05 0.19807744E+03-0.53730826E+01 0.10223204E+00-0.10227678E-03     3
 0.31345117E-07 0.19016444E-11-0.73529555E+05 0.53343410E+02                     4
mhxcy2om  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.24505630E+02 0.11746509E+00-0.55752975E-04 0.11261142E-07-0.82069215E-12     2
-0.63368641E+05 0.17237735E+03-0.84965601E+01 0.13002159E+00-0.10923063E-03     3
 0.33074155E-07 0.18733355E-11-0.73822133E+05 0.68028419E+02                     4
mhx6ooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.20319541E+01 0.81643969E-01-0.33704408E-04 0.61656293E-08-0.41825384E-12     2
-0.69644133E+05 0.62949562E+02 0.20916308E+00 0.10595698E+00-0.76146964E-04     3
 0.19248761E-07 0.22726686E-11-0.73703203E+05 0.39342968E+02                     4
mhx5ooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.62427616E+01 0.89566045E-01-0.37974751E-04 0.70778396E-08-0.48653491E-12     2
-0.70477586E+05 0.86531265E+02-0.41979301E+00 0.11125504E+00-0.85132669E-04     3
 0.24999860E-07 0.10939196E-11-0.76222344E+05 0.41828461E+02                     4
mhx4ooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.62427616E+01 0.89566045E-01-0.37974751E-04 0.70778396E-08-0.48653491E-12     2
-0.70205844E+05 0.85838181E+02-0.41979301E+00 0.11125504E+00-0.85132669E-04     3
 0.24999860E-07 0.10939196E-11-0.75950602E+05 0.41135376E+02                     4
mhx3ooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.62427616E+01 0.89566045E-01-0.37974751E-04 0.70778396E-08-0.48653491E-12     2
-0.70205844E+05 0.85838181E+02-0.41979301E+00 0.11125504E+00-0.85132669E-04     3
 0.24999860E-07 0.10939196E-11-0.75950602E+05 0.41135376E+02                     4
mhx2ooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.39585197E+02 0.15202576E-01-0.32004300E-05 0.36206940E-09-0.17752765E-13     2
-0.88033359E+05-0.17102917E+03 0.11795717E+01 0.98238990E-01-0.58291942E-04     3
 0.90115329E-08 0.17874441E-11-0.75305508E+05 0.35442398E+02                     4
mhxmooh  24/03/07     c   7h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.46991146E+00 0.77746361E-01-0.31467618E-04 0.56770584E-08-0.38133524E-12     2
-0.73743758E+05 0.53864685E+02-0.34646838E+01 0.11829125E+00-0.90728383E-04     3
 0.25334856E-07 0.15750630E-11-0.76573570E+05 0.56595638E+02                     4
mhx6o  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.16860226E+01 0.73350981E-01-0.28981667E-04 0.51400586E-08-0.34108540E-12     2
-0.51985512E+05 0.56684635E+02-0.26270781E+01 0.10658357E+00-0.85005922E-04     3
 0.30410089E-07-0.19561676E-11-0.54980488E+05 0.49945183E+02                     4
mhx5o  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.60025387E+01 0.81319645E-01-0.33172910E-04 0.60178031E-08-0.40580820E-12     2
-0.51698859E+05 0.80229065E+02-0.29293840E+01 0.10960063E+00-0.88471905E-04     3
 0.30610348E-07-0.11560853E-11-0.56477594E+05 0.50359032E+02                     4
mhx4o  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.60025387E+01 0.81319645E-01-0.33172910E-04 0.60178031E-08-0.40580820E-12     2
-0.51698859E+05 0.80229065E+02-0.29293840E+01 0.10960063E+00-0.88471905E-04     3
 0.30610348E-07-0.11560853E-11-0.56477594E+05 0.50359032E+02                     4
mhx3o  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.60025387E+01 0.81319645E-01-0.33172910E-04 0.60178031E-08-0.40580820E-12     2
-0.51698859E+05 0.80229065E+02-0.29293840E+01 0.10960063E+00-0.88471905E-04     3
 0.30610348E-07-0.11560853E-11-0.56477594E+05 0.50359032E+02                     4
mhx2o  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36650700E+02 0.13422005E-01-0.25364350E-05 0.26367755E-09-0.12184333E-13     2
-0.68159750E+05-0.16010205E+03-0.16591166E+01 0.98753043E-01-0.66506422E-04     3
 0.19110590E-07-0.19108805E-11-0.55524113E+05 0.45379112E+02                     4
mhxmo  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.32067123E+00 0.69884904E-01-0.27048651E-04 0.47292890E-08-0.31074516E-12     2
-0.56021707E+05 0.47961273E+02-0.59490666E+01 0.11646619E+00-0.93670787E-04     3
 0.30564902E-07-0.54643589E-12-0.57888344E+05 0.65017693E+02                     4
mhx5oh6j  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.46326642E+01 0.78355797E-01-0.31534706E-04 0.56661658E-08-0.37949553E-12     2
-0.54576953E+05 0.76008881E+02-0.25355999E+01 0.11513834E+00-0.10710840E-03     3
 0.49291632E-07-0.73940220E-11-0.59377520E+05 0.49738987E+02                     4
mhx4oh5j  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.51718535E+01 0.78736782E-01-0.31630792E-04 0.56755720E-08-0.37972029E-12     2
-0.54856594E+05 0.79194679E+02-0.17569206E+01 0.11055627E+00-0.99924218E-04     3
 0.44254911E-07-0.59713363E-11-0.59943312E+05 0.46470501E+02                     4
mhx3oh4j  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.48957343E+01 0.78155965E-01-0.31321160E-04 0.56114255E-08-0.37507652E-12     2
-0.54908859E+05 0.77790375E+02-0.28700001E+01 0.11843094E+00-0.11767978E-03     3
 0.60636836E-07-0.11414370E-10-0.59834371E+05 0.51119450E+02                     4
-0.75836117E+05 0.17142754E+03 0.94168806E+00 0.10834479E+00-0.88401146E-04     3
 0.28075846E-07 0.10809180E-10-0.87695797E+05 0.38052467E+02                     4
mhx5ooh4*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.21079313E+02 0.11501611E+00-0.52714920E-04 0.10383395E-07-0.74285912E-12     2
-0.77346062E+05 0.17245810E+03-0.35392293E+00 0.11306776E+00-0.90225782E-04     3
 0.25150001E-07 0.29162844E-11-0.89017141E+05 0.44158970E+02                     4
mhx3ooh4*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.21079313E+02 0.11501611E+00-0.52714920E-04 0.10383395E-07-0.74285912E-12     2
-0.77346062E+05 0.17176505E+03-0.35392293E+00 0.11306776E+00-0.90225782E-04     3
 0.25150001E-07 0.29162844E-11-0.89017141E+05 0.43465897E+02                     4
mhx2ooh4*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.21079313E+02 0.11501611E+00-0.52714920E-04 0.10383395E-07-0.74285912E-12     2
-0.77346062E+05 0.17245811E+03-0.35392293E+00 0.11306776E+00-0.90225782E-04     3
 0.25150001E-07 0.29162844E-11-0.89017141E+05 0.44158978E+02                     4
mhx6ooh3*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19133223E+02 0.11053117E+00-0.50021510E-04 0.97644541E-08-0.69402454E-12     2
-0.77920898E+05 0.16208391E+03-0.16093419E+01 0.11332668E+00-0.91417533E-04     3
 0.29327808E-07 0.55925918E-12-0.88184961E+05 0.52102028E+02                     4
mhx5ooh3*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.23222979E+02 0.11859114E+00-0.54632288E-04 0.10800215E-07-0.77472100E-12     2
-0.78859219E+05 0.18482349E+03-0.20496898E+01 0.11731447E+00-0.97250922E-04     3
 0.31927438E-07 0.49765687E-12-0.90724242E+05 0.53789059E+02                     4
mhx4ooh3*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
!!!Probleme avec THERGAS
mo6oh2*o  03/10/08     c   9h  16o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.93238049E+01 0.94250128E-01-0.41391857E-04 0.79094020E-08-0.55353974E-12     2
-0.78086766E+05 0.10765195E+03 0.15029451E+00 0.11062257E+00-0.86699038E-04     3
 0.24865454E-07 0.17648323E-11-0.85347383E+05 0.42256737E+02                     4
mhx6ooh2*o  02/10/08     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.93238049E+01 0.94250128E-01-0.41391857E-04 0.79094020E-08-0.55353974E-12     2
-0.78086766E+05 0.10765195E+03 0.15029451E+00 0.11062257E+00-0.86699038E-04     3
 0.24865454E-07 0.17648323E-11-0.85347383E+05 0.42256737E+02                     4
mpe5j2*o  02/10/08     c   6h   9o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     2
-0.42901285E+05 0.59976345E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.42901285E+05 0.59976345E+02                     4
mhx2ooh3*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
mhx5ooh2*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
mhx4ooh2*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
mhx3ooh2*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
mhxmooh2*o 23/03/07     c   7h  12o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.19576473E+02 0.11265955E+00-0.51488143E-04 0.10121197E-07-0.72302949E-12     2
-0.79364047E+05 0.16339778E+03-0.29688408E+01 0.11848151E+00-0.94244759E-04     3
 0.27360741E-07 0.20718607E-11-0.89499320E+05 0.57787434E+02                     4
mhxcy6o4  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.28958994E+02 0.12651365E+00-0.61114522E-04 0.12501499E-07-0.91965910E-12     2
-0.58930633E+05 0.19952661E+03-0.36929026E+01 0.11506915E+00-0.94190698E-04     3
 0.28112556E-07 0.22109489E-11-0.71977969E+05 0.46990864E+02                     4
mhxcy5o3  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.28958994E+02 0.12651365E+00-0.61114522E-04 0.12501499E-07-0.91965910E-12     2
-0.58930633E+05 0.19952661E+03-0.36929026E+01 0.11506915E+00-0.94190698E-04     3
 0.28112556E-07 0.22109489E-11-0.71977969E+05 0.46990864E+02                     4
mhxcy4o2  23/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.29045643E+02 0.12818998E+00-0.62460931E-04 0.12857120E-07-0.95024054E-12     2
-0.60815547E+05 0.19807744E+03-0.53730826E+01 0.10223204E+00-0.10227678E-03     3
 0.31345117E-07 0.19016444E-11-0.73529555E+05 0.53343410E+02                     4
hxaoj2*o  24/03/07     c   6h   9o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     2
-0.45598113E+05 0.56358952E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.45598113E+05 0.56358952E+02                     4
mhx3d2j   24/03/07     c   7h  11o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     2
-0.29854617E+05 0.56262314E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00     3
mhx2oh3j  24/03/07     c   7h  13o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.36677528E+02 0.12588153E-01-0.22675060E-05 0.23013569E-09-0.10626570E-13     2
-0.71286531E+05-0.15673459E+03-0.13901811E+01 0.10612170E+00-0.92184171E-04     3
 0.45596948E-07-0.10911470E-10-0.59174902E+05 0.45255562E+02                     4
mhx5oh6oo 24/03/07     c   7h  13o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.28163831E+01 0.83171524E-01-0.33600623E-04 0.60544978E-08-0.40636786E-12     2
-0.71526469E+05 0.71656662E+02-0.10658985E+01 0.11877045E+00-0.98339427E-04     3
 0.34191640E-07-0.12505182E-11-0.76362273E+05 0.47167210E+02                     4
mhx4oh5oo 24/03/07     c   7h  13o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.70647340E+01 0.91080695E-01-0.37796613E-04 0.69384716E-08-0.47179350E-12     2
-0.72335109E+05 0.94787910E+02-0.12468305E+01 0.12095295E+00-0.99816738E-04     3
 0.32420072E-07 0.24369927E-12-0.78929266E+05 0.47064323E+02                     4
mhx3oh4oo 24/03/07     c   7h  13o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.71842208E+01 0.91290422E-01-0.37912807E-04 0.69644646E-08-0.47383321E-12     2
-0.72016211E+05 0.95451988E+02-0.12151521E+01 0.12071470E+00-0.99200639E-04     3
 0.31764078E-07 0.48919787E-12-0.78660648E+05 0.46931465E+02                     4
mhx2oh3oo 24/03/07     c   7h  13o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.35631073E+01 0.85617594E-01-0.35075009E-04 0.63829391E-08-0.43144861E-12     2
-0.72816453E+05 0.74760422E+02-0.25549130E+01 0.12480350E+00-0.10322003E-03     3
 0.34212508E-07-0.41877434E-12-0.77662523E+05 0.53402985E+02                     4
mhx4d3j   24/03/07     c   7h  11o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.10266509E+02 0.44004969E-01-0.15429778E-04 0.25170765E-08-0.15758907E-12     2
-0.35321074E+05-0.14356628E+02 0.71501535E+00 0.80981418E-01-0.60386370E-04     3
 0.22835749E-07-0.29616097E-11-0.33791141E+05 0.31052708E+02                     4
mhxm*o    24/03/07     c   7h  12o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.75069942E+01 0.56921959E-01-0.22256296E-04 0.39201749E-08-0.25897088E-12     2
-0.74158086E+05 0.46376419E+01 0.17923557E+01 0.83564535E-01-0.53152380E-04     3
 0.12470196E-07 0.11021625E-11-0.73875773E+05 0.29728140E+02                     4
mhxmj*o   24/03/07     c   7h  11o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.10034598E+02 0.48245698E-01-0.17297325E-04 0.28663487E-08-0.18142664E-12     2
-0.57016172E+05-0.71131821E+01 0.20757229E+01 0.82651481E-01-0.61457671E-04     3
 0.23289418E-07-0.29167079E-11-0.56098785E+05 0.29415295E+02                     4
c4h9coo3  23/03/07     c   4h   9o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     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
c5h10co   23/03/07     c   6h  10o   1    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.15380598E+02 0.19330256E-01-0.49485029E-05 0.64723293E-09-0.34982888E-13     2
-0.15418347E+05-0.64999435E+02-0.81360316E+00 0.56001425E-01-0.31573854E-04     3
 0.65452399E-08 0.21331035E-12-0.10208771E+05 0.21479574E+02                     4
c5h8co    23/03/07     c   6h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.14888533E+02 0.15395069E-01-0.37840589E-05 0.47990589E-09-0.25378134E-13     2
-0.30305977E+04-0.63218002E+02-0.14713103E+01 0.56100886E-01-0.35885139E-04     3
 0.72507103E-08 0.9545842E-12 0.17880028E+04 0.22634590E+02                     4
mo7oh8j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.14195902E+01 0.91479316E-01-0.36147667E-04 0.64126389E-08-0.42567436E-12     2
-0.61252094E+05 0.62915550E+02-0.30554850E+01 0.13943858E+00-0.12237918E-03     3
 0.53168254E-07-0.73610588E-11-0.65153824E+05 0.55521027E+02                     4
mo6oh7j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.17161945E+01 0.91441281E-01-0.36021545E-04 0.63741812E-08-0.42224956E-12     2
-0.61627664E+05 0.64748337E+02-0.21969306E+01 0.13430625E+00-0.11388841E-03     3
 0.46849454E-07-0.54943350E-11-0.65728188E+05 0.51913860E+02                     4
mo5oh6j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12     2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03     3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                     4
mo4oh5j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12     2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03     3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                     4
mo3oh4j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.15088651E+01 0.90987302E-01-0.35789486E-04 0.63287366E-08-0.41915150E-12     2
-0.61653250E+05 0.63724861E+02-0.32201054E+01 0.14155917E+00-0.13015501E-03     3
 0.61749354E-07-0.10414250E-10-0.65628898E+05 0.56181812E+02                     4
mo2oh3j   15/06/06     c   9h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.43076736E+02 0.20371886E-01-0.42784359E-05 0.48343490E-09-0.23699018E-13     2
-0.79226906E+05-0.18764110E+03-0.16416386E+01 0.12874746E+00-0.10402474E-03     3
 0.46773234E-07-0.10213210E-10-0.64982098E+05 0.49877514E+02                     4
mo7oh8oo  15/06/06     c   9h  17o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.77307582E+00 0.95642157E-01-0.37875441E-04 0.67305224E-08-0.44736163E-12     2
-0.78348141E+05 0.56466606E+02-0.11834583E+01 0.14031142E+00-0.10707212E-03     3
 0.31643896E-07 0.10177159E-11-0.82182039E+05 0.51240215E+02                     4
mo6oh7oo  15/06/06     c   9h  17o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.34928293E+01 0.10351229E+00-0.42000131E-04 0.75910958E-08-0.51060062E-12     2
-0.79137297E+05 0.79731750E+02-0.18038790E+01 0.14553791E+00-0.11585146E-03     3
 0.37150976E-07-0.60581138E-13-0.84701922E+05 0.52999142E+02                     4
mo5oh6oo  15/06/06     c   9h  17o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.36199951E+01 0.10372973E+00-0.42108932E-04 0.76128908E-08-0.51214203E-12     2
```

```
-0.78816086E+05 0.80438316E+02-0.18100102E+01 0.14556056E+00-0.11585270E-03    3
 0.37096619E-07-0.21603416E-13-0.84429273E+05 0.53025894E+02                   4
mo4oh5oo    15/06/06      c    9h   17o    5    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.36199951E+01 0.10372973E+00-0.42108932E-04 0.76128908E-08-0.51214203E-12    2
-0.78816086E+05 0.80438316E+02-0.18100102E+01 0.14556056E+00-0.11585270E-03    3
 0.37096619E-07-0.21603416E-13-0.84429273E+05 0.53025894E+02                   4
mo2oh3oo    15/06/06      c    9h   17o    5    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.63741722E+02 0.12518043E-02 0.20508817E-08-0.67711544E-11 0.58922306E-15    2
-0.10632022E+06-0.30111230E+03 0.18851343E+01 0.12085181E+00-0.69817899E-04    3
 0.12731748E-07-0.66569260E-12-0.84041695E+05 0.37408257E+02                   4
mhp6d5j     15/06/06      c    8h   13o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.44219073E-01 0.70866957E-01-0.27805301E-04 0.49079989E-08-0.32463190E-12    2
-0.32030406E+05 0.45783100E+02-0.11977427E+01 0.10105871E+00-0.77244222E-04    3
 0.26512236E-07-0.15066508E-11-0.34569336E+05 0.41984074E+02                   4
mpe5j4*o    14/06/06      c    6h    9o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.87085981E+01 0.71931526E-01-0.30480620E-04 0.56795955E-08-0.39308887E-12    2
-0.44406211E+05 0.93415451E+02-0.99816960E+00 0.88593550E-01-0.80193604E-04    3
 0.34670091E-07-0.41471978E-11-0.50372918E+05 0.39623867E+02                   4
mhx6j5*o    14/06/06      c    7h   11o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.69915266E+01 0.78219064E-01-0.32569340E-04 0.59930012E-08-0.40818160E-12    2
-0.47775875E+05 0.86291542E+02-0.11382353E+01 0.99906430E-01-0.85789550E-04    3
 0.34542023E-07-0.33889519E-11-0.53273879E+05 0.42010025E+02                   4
mb4j*o2*o   14/06/06      c    5h    5o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.58281699E+05 0.59326897E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.58281699E+05 0.59326897E+02                   4
mhx6j*o4*o  14/06/06      c    7h    9o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.26122992E+02 0.10898409E+00-0.49620063E-04 0.97276223E-08-0.69354039E-12    2
-0.57023988E+05 0.19894524E+03-0.11657679E+01 0.97621359E-01-0.85742846E-04    3
 0.32740136E-07-0.14453467E-11-0.69861688E+05 0.48488087E+02                   4
mhp7j*o5*o  14/06/06      c    8h   11o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.24492342E+02 0.11521308E+00-0.51524024E-04 0.99730091E-08-0.70448931E-12    2
-0.60323914E+05 0.19240294E+03-0.14154447E+01 0.10971615E+00-0.93283568E-04    3
 0.34619941E-07-0.14198768E-11-0.72751164E+05 0.51333286E+02                   4
mpe4d3j     14/06/06      c    6h    9o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.31912885E+01 0.57779048E-01-0.23212597E-04 0.41666604E-08-0.27891871E-12    2
-0.25345244E+05 0.59007385E+02-0.72652018E+00 0.77089004E-01-0.62767314E-04    3
 0.23433193E-07-0.18242742E-11-0.28787646E+05 0.36412937E+02                   4
mo8j*o      14/06/06      c    9h   15o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.55258007E+01 0.92573963E-01-0.37460704E-04 0.67579529E-08-0.45396366E-12    2
-0.55506043E+05 0.85218338E+02-0.19721669E+00 0.11688342E+00-0.91450645E-04    3
 0.32342509E-07-0.17907361E-11-0.61121492E+05 0.42901314E+02                   4
momj*o      14/06/06      c    9h   15o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.13064289E+02 0.61758228E-01-0.22165750E-04 0.36743457E-08-0.23254256E-12    2
-0.63631668E+05-0.19219986E+02 0.14760723E+01 0.10749172E+00-0.77987250E-04    3
 0.28379345E-07-0.32969729E-11-0.61866395E+05 0.35536945E+02                   4
mo8*o       14/06/06      c    9h   16o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.85751486E+01 0.10277593E+00-0.43698288E-04 0.81611606E-08-0.56183828E-12    2
-0.72531508E+05 0.99601158E+02-0.85115528E+00 0.12038428E+00-0.89113324E-04    3
 0.27268390E-07 0.25093924E-12-0.78860695E+05 0.44772598E+02                   4
mom*o       14/06/06      c    9h   16o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.10594236E+02 0.70299558E-01-0.27024953E-04 0.47024971E-08-0.30793591E-12    2
-0.80790977E+05-0.77771683E+01 0.12272024E+01 0.10815404E+00-0.69052403E-04    3
 0.16907117E-07 0.96063988E-12-0.79646906E+05 0.35701897E+02                   4
c4h8cho-1   07/06/06      c    5h    9o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    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
c4h8cho-2   07/06/06      c    5h    9o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 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
c4h8cho-3   07/06/06      c    5h    9o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.68666039E+01 0.32557849E-01-0.11075254E-04 0.17694749E-08-0.10924736E-12    2
-0.73954170E+04-0.83708954E+00-0.52637470E+00 0.70186205E-01-0.74044103E-04    3
 0.46550575E-07-0.12154586E-10-0.66132061E+04 0.32172165E+02                   4
c4h8cho-4   07/06/06      c    5h    9o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 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
bucomeco    07/06/06      c    7h   11o    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
```

```
prcoetco    07/06/06      c    7h   11o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43233359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
prcomeco    07/06/06      c    6h    9o    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
etcoetco    07/06/06      c    6h    9o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899977E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060309E+05 0.26899633E+02                   4
etcomeco    07/06/06      c    5h    7o    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
mecoetco    07/06/06      c    5h    7o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    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
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
-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
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
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
ic4h5       c    4h    5    0    0G    300.00    5000.0    1000.0    1
 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    1000.0    1
 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
c4h3        c    4h    3    0    0G    300.00    5000.00  1000.00    1
 0.84874200E+01 0.86908890E-02-0.28544400E-05 0.41200100E-09-0.21300000E-13    2
 0.47970600E+05-0.19019000E+02 0.35539700E+01 0.19461990E-01-0.48102500E-05    3
-0.97301200E-08 0.62390500E-11 0.49453900E+05 0.70830000E+01                   4
nc4h3       c    4h    3    0    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    3    0    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
c4h4        c    4h    4    0    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-04-0.12703205E-05    3
-0.09410096E-07 0.02956110E-10 0.03301097E+06 0.09922676E+02                   4
mhx5d4j     06/06/06      c    7h   11o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.15613327E+01 0.64294070E-01-0.25484620E-04 0.45303472E-08-0.30113648E-12    2
-0.28692469E+05 0.52329239E+02-0.70053124E+00 0.87259173E-01-0.65642540E-04    3
 0.20612276E-07-0.12028033E-12-0.31706502E+05 0.38091030E+02                   4
c5h8        01/06/06      c    5h    8o    0    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.11570503E+02 0.24057562E-01-0.89857949E-05 0.15321914E-08-0.98913472E-13    2
 0.32528965E+04-0.37827194E+02 0.34431732E+01 0.33499036E-01-0.79123965E-05    3
-0.65547534E-09-0.31700375E-12 0.68922251E+04 0.91199865E+01                   4
c6h10       01/06/06      c    6h   10o    0    0g    300.000    5000.000 1000.000    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       01/06/06      c    7h   12o    0    0g    300.000    5000.000 1000.000    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
c7h12co     01/06/06      c    8h   12o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.20789326E+02 0.24168372E-01-0.63997218E-05 0.85574348E-09-0.46830920E-13    2
-0.10794459E+05-0.91410126E+02-0.18745028E+01 0.79780355E-01-0.50259776E-04    3
 0.10959952E-07 0.75477715E-12-0.40029751E+04 0.27895624E+02                   4
mo7d6j      01/06/06      c    9h   15o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.18178813E+01 0.77162467E-01-0.29993556E-04 0.52600000E-08-0.34634925E-12    2
```

```
-0.35436332E+05 0.38296410E+02-0.13503360E+01 0.11248755E+00-0.83203631E-04    3
 0.26836535E-07-0.94024094E-12-0.37469320E+05 0.44417923E+02                   4
mo6d5j      01/06/06      c    9h   15o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.13683599E+02 0.56885567E-01-0.20007186E-04 0.32709602E-08-0.20510793E-12    2
-0.42091840E+05-0.28672737E+02 0.24752815E+00 0.10495278E+00-0.74950272E-04    3
 0.26095680E-07-0.27432863E-11-0.39573559E+05 0.36570988E+02                   4
mo5d4j      01/06/06      c    9h   15o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.45442657E+01 0.72217926E-01-0.27471253E-04 0.47456412E-08-0.30922481E-12    2
-0.38500227E+05 0.22252907E+02-0.13341333E+01 0.11133200E+00-0.82278188E-04    3
 0.27751108E-07-0.17991589E-11-0.39363270E+05 0.43852840E+02                   4
mo4d3j      01/06/06      c    9h   15o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.45442657E+01 0.72217926E-01-0.27471253E-04 0.47456412E-08-0.30922481E-12    2
-0.38500227E+05 0.22252907E+02-0.13341333E+01 0.11133200E+00-0.82278188E-04    3
 0.27751108E-07-0.17991589E-11-0.39363270E+05 0.43852840E+02                   4
mo3d2j      01/06/06      c    9h   15o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.34822949E+05 0.65780258E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.34822949E+05 0.65780258E+02                   4
mhp6d4d     01/06/06      c    8h   12o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.22469046E+02 0.11055565E+00-0.51111972E-04 0.10130162E-07-0.72802615E-12    2
-0.27521785E+05 0.16854941E+03-0.34527760E+01 0.11001201E+00-0.89478563E-04    3
 0.27745577E-07 0.12397931E-11-0.38274789E+05 0.50552830E+02                   4
mhx5d3d     01/06/06      c    7h   10o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.38136478E+02-0.61676083E-02 0.71911613E-05-0.18594652E-08 0.15392429E-12    2
-0.48841711E+05-0.16985049E+03-0.19962060E+00 0.61237689E-01-0.22540484E-04    3
-0.12777778E-08 0.44975503E-12-0.34502301E+05 0.42158558E+02                   4
mpe4d2d     01/06/06      c    6h    8o    2    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.27026245E+02 0.99368177E-01-0.47995258E-04 0.98168957E-08-0.72211600E-12    2
-0.20747236E+05 0.18922659E+03-0.26724977E+01 0.83160140E-01-0.72846997E-04    3
 0.24793362E-07 0.60880424E-12-0.32723355E+05 0.44305882E+02                   4
mhp7o       01/06/06      c    8h   15o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.63277997E-01 0.79896912E-01-0.31290885E-04 0.55157785E-08-0.36446559E-12    2
-0.55331281E+05 0.50041557E+02-0.27305040E+01 0.11764069E-01-0.90000372E-04    3
 0.29700701E-07-0.99984485E-12-0.57885266E+05 0.52174271E+02                   4
mo8ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.11463405E+01 0.94769426E-01-0.38270038E-04 0.68935706E-08-0.46256109E-12    2
-0.76297070E+05 0.50073135E+02-0.29842868E+00 0.13015904E+00-0.91146816E-04    3
 0.22818067E-07 0.24275070E-11-0.79480656E+05 0.45071339E+02                   4
mo7ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.77165094E+05 0.73003487E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.82001703E+05 0.47483391E+02                   4
mo6ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo5ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo4ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo3ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.29401536E+01 0.10239148E+00-0.42318858E-04 0.77476772E-08-0.52586277E-12    2
-0.76893344E+05 0.72310402E+02-0.91025209E+00 0.13534522E+00-0.99884805E-04    3
 0.28346397E-07 0.13182114E-11-0.81729961E+05 0.46790310E+02                   4
mo2ooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13    2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04    3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
momooh      01/06/06      c    9h   18o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.29046974E+01 0.90577140E-01-0.35911162E-04 0.63844583E-08-0.42438627E-12    2
-0.80481422E+05 0.39872284E+02-0.39461792E+01 0.14232999E+00-0.10538402E-03    3
 0.28611993E-07 0.18146426E-11-0.82354047E+05 0.62211113E+02                   4
mo8o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.15501566E+01 0.86463690E-01-0.33614848E-04 0.58951644E-08-0.38814343E-12    2
-0.58673855E+05 0.43448639E+02-0.29764497E+01 0.12969519E+00-0.97409786E-04    3
 0.31417777E-07-0.90680360E-12-0.6077493E+05 0.55005421E+02                    4
mo7o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.27267587E+01 0.94303980E-01-0.37685841E-04 0.67382007E-08-0.44974953E-12    2
-0.58394219E+05 0.66800171E+02-0.35545166E+01 0.13462344E+00-0.10546105E-03    3
 0.36186456E-07-0.17196877E-11-0.62242527E+05 0.56587658E+02                   4
mo6o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211051E+05 0.65548798E+02-0.31961482E+01 0.13215069E+00-0.99559293E-04    3
 0.30339272E-07 0.33297708E-12-0.62009301E+05 0.55066666E+02                   4
```

```
mo5o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo4o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo3o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25027137E+01 0.93915187E-01-0.37479382E-04 0.66938353E-08-0.44638143E-12    2
-0.58211020E+05 0.65548248E+02-0.32112167E+01 0.13225305E+00-0.99800476E-04    3
 0.30576025E-07 0.25037771E-12-0.62007648E+05 0.55130177E+02                   4
mo2o        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.42976402E+02 0.21352954E-01-0.46354780E-05 0.53311217E-09-0.26235099E-13    2
-0.76074609E+05-0.19060928E+03-0.19731333E+01 0.12182116E+00-0.79428959E-04    3
 0.21383739E-07-0.16059263E-11-0.61324738E+05 0.50264374E+02                   4
momo        01/06/06      c    9h   17o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.28740697E+01 0.83087981E-01-0.31736774E-04 0.54964460E-08-0.35867983E-12    2
-0.62698340E+05 0.34945259E+02-0.63202548E+01 0.13972679E+00-0.10642358E-03    3
 0.31908517E-07 0.38937690E-12-0.63680445E+05 0.70170967E+02                   4
mpe5oo      31/05/06      c    6h   11o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.11794124E+01 0.67327976E-01-0.26784741E-04 0.47736983E-08-0.31788783E-12    2
-0.49383172E+05 0.55336651E+02-0.84760487E+00 0.97614326E-01-0.79072466E-04    3
 0.26808342E-07-0.75868391E-12-0.52849410E+05 0.41667435E+02                   4
mpe5ooh4j   31/05/06      c    6h   11o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.60995616E-01 0.64236596E-01-0.25018233E-04 0.43928678E-08-0.28946886E-12    2
-0.43661156E+05 0.53517467E+02-0.77777320E+00 0.10641504E+00-0.10782654E-03    3
 0.56058742E-07-0.10659003E-10-0.47273395E+05 0.43064930E+02                   4
mpe5ooh3j   31/05/06      c    6h   11o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.60995616E-01 0.64236596E-01-0.25018233E-04 0.43928678E-08-0.28946886E-12    2
-0.43661156E+05 0.53517467E+02-0.77777320E+00 0.10641504E+00-0.10782654E-03    3
 0.56058742E-07-0.10659003E-10-0.47273395E+05 0.43064930E+02                   4
mpe5ooh2j   31/05/06      c    6h   11o    4    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.55351073E+00 0.66277191E-01-0.26260022E-04 0.46679931E-08-0.31033729E-12    2
-0.46823195E+05 0.53401531E+02-0.32106036E+00 0.10213961E+00-0.94775001E-04    3
 0.42939234E-07-0.62246553E-11-0.50533480E+05 0.38912380E+02                   4
mpecy3o5    31/05/06      c    6h   10o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25929640E+02 0.11287239E+00-0.55475419E-04 0.11491243E-07-0.85329009E-12    2
-0.56855973E+05 0.17955170E+03-0.47936420E+01 0.10713824E+00-0.90853275E-04    3
 0.28869142E-07 0.12092014E-11-0.68089250E+05 0.50664215E+02                   4
mpecy2o5    31/05/06      c    6h   10o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.25929640E+02 0.11287239E+00-0.55475419E-04 0.11491243E-07-0.85329009E-12    2
-0.56855973E+05 0.17955170E+03-0.47936420E+01 0.10713824E+00-0.90853275E-04    3
 0.28869142E-07 0.12092014E-11-0.68089250E+05 0.50664215E+02                   4
mpe5ooh4oo  31/05/06      c    6h   11o    6    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.21457834E+01 0.76921917E-01-0.31299642E-04 0.56677267E-08-0.38170305E-12    2
-0.60832227E+05 0.70091110E+02 0.60747337E+00 0.11059815E+00-0.93982453E-04    3
 0.31883012E-07-0.44127538E-12-0.66071234E+05 0.40013927E+02                   4
mpe5ooh3oo  31/05/06      c    6h   11o    6    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.20768893E+01 0.76801077E-01-0.31233601E-04 0.56531344E-08-0.38056865E-12    2
-0.60859195E+05 0.69707619E+02 0.57979995E+00 0.11079118E+00-0.94452225E-04    3
 0.32360951E-07-0.61428044E-12-0.66068273E+05 0.40130882E+02                   4
mpe5ooh2oo  31/05/06      c    6h   11o    6    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.39949493E+02 0.10406585E-01-0.16931812E-05 0.15173407E-09-0.60581058E-14    2
-0.77409305E+05-0.16732471E+03 0.19985974E+01 0.98982193E-01-0.70369191E-04    3
 0.18947080E-07-0.75476696E-12-0.65403305E+05 0.34515236E+02                   4
mpe3ooh5*o  31/05/06      c    6h   10o    5    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.14662412E+02 0.93957052E-01-0.42555305E-04 0.83121066E-08-0.59100489E-12    2
-0.73968984E+05 0.13532010E+03 0.14699309E+01 0.96330002E-01-0.79727441E-04    3
 0.25157989E-07 0.99966617E-12-0.83427430E+05 0.34080875E+02                   4
mpe2ooh5*o  31/05/06      c    6h   10o    5    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.11127309E+02 0.88265002E-01-0.39570550E-04 0.76723250E-08-0.54261554E-12    2
-0.74710500E+05 0.11518449E+03 0.38398278E+00 0.98629996E-01-0.79378136E-04    3
 0.23175076E-07 0.16838372E-11-0.82456078E+05 0.39481899E+02                   4
mpe4ooh5*o  31/05/06      c    6h   10o    5    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.11127309E+02 0.88265002E-01-0.39570550E-04 0.76723250E-08-0.54261554E-12    2
-0.74710500E+05 0.11449141E+03 0.38398278E+00 0.98629996E-01-0.79378136E-04    3
 0.23175076E-07 0.16838372E-11-0.82456078E+05 0.38788818E+02                   4
oaoj2*o     30/05/06      c    8h   13o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.50566457E+05 0.65813957E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.50566457E+05 0.65813957E+02                   4
c2h5coc2h4  29/05/06      c    5h    9o    1    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
 0.15697845E+02 0.19031726E-01-0.52147357E-05 0.71394135E-09-0.39655484E-13    2
-0.13728694E+05-0.52360275E+02-0.16847492E+01 0.67190818E-01-0.59479593E-04    3
 0.32237519E-07-0.80699102E-11-0.86122041E+04 0.38187481E+02                   4
mhx6*o      29/05/06      c    7h   12o    3    0g    300.000    5000.000 1000.000    1
-0.12157108E+02 0.90588890E-01-0.39811232E-04 0.76105007E-08-0.53275087E-12    2
```

```
-0.65759461E+05 0.11461126E+03-0.32118267E+00 0.96001990E-01-0.73607909E-04    3
 0.23112262E-07 0.33480830E-12-0.73085328E+05 0.38952679E+02                   4
mpe5*o    29/05/06      c   6h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.13791258E+02 0.84301457E-01-0.37831418E-04 0.73403816E-08-0.51941074E-12    2
-0.62446332E+05 0.12120752E+03-0.82330197E-01 0.84006540E-01-0.66365050E-04    3
 0.21586454E-07 0.16528493E-12-0.70195047E+05 0.36151474E+02                   4
mhx6j*o   29/05/06      c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.89733496E+01 0.79922460E-01-0.33141045E-04 0.60808949E-08-0.41335495E-12    2
-0.48751082E+05 0.99583961E+02 0.33462444E+00 0.92481129E-01-0.75881078E-04    3
 0.28108058E-07-0.16747699E-11-0.55346223E+05 0.37071075E+02                   4
mpe5j*o   29/05/06      c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10523424E+02 0.73326841E-01-0.30864318E-04 0.57219371E-08-0.39176602E-12    2
-0.45446195E+05 0.10578487E+03 0.49315983E+00 0.81042960E-01-0.69977716E-04    3
 0.27920230E-07-0.23180869E-11-0.52447348E+05 0.34607738E+02                   4
mhx6j5*o   29/05/06     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.69915266E+01 0.78219064E-01-0.32569340E-04 0.59930012E-08-0.40818160E-12    2
-0.47775875E+05 0.86291542E+02-0.11382353E+01 0.99906430E-01-0.85789550E-04    3
 0.34542023E-07-0.33889519E-11-0.53273879E+05 0.42010025E+02                   4
mhx6j4*o   29/05/06     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19924454E+02 0.99570557E-01-0.43679371E-04 0.83392733E-08-0.58322731E-12    2
-0.41332730E+05 0.16056046E+03-0.17016495E+01 0.10753243E+00-0.10537948E-03    3
 0.50357595E-07-0.72712487E-11-0.52136746E+05 0.45235870E+02                   4
mpe5j4*o   29/05/06     c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.87085981E+01 0.71931526E-01-0.30480620E-04 0.56795955E-08-0.39038887E-12    2
-0.44406211E+05 0.93415451E+02-0.99816960E+00 0.88593550E-01-0.80193604E-04    3
 0.34670091E-07-0.41471978E-11-0.50372918E+05 0.39623867E+02                   4
mpe5j3*o   29/05/06     c   6h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20214968E+02 0.91222845E-01-0.40646319E-04 0.78474303E-08-0.55333093E-12    2
-0.39978219E+05 0.15966469E+03-0.40681415E+01 0.10087004E+00-0.10192383E-03    3
 0.50771501E-07-0.81750526E-11-0.49729480E+05 0.56715321E+02                   4
mb4j3*o   29/05/06      c   5h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.90541220E+01 0.63599467E-01-0.27383188E-04 0.51595150E-08-0.35744278E-12    2
-0.43020027E+05 0.92859528E+02-0.31302316E+01 0.80275625E-01-0.72685136E-04    3
 0.30962674E-07-0.35665145E-11-0.47990324E+05 0.50114769E+02                   4
mb4j2*o   29/05/06      c   5h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.40417121E+05 0.55247940E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.40417121E+05 0.55247940E+02                   4
c7h14co   29/05/06      c   8h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.21274084E+02 0.28127572E-01-0.75822236E-05 0.10261592E-08-0.56566575E-13    2
-0.23182180E+05-0.93158524E+02-0.91747171E+00 0.77609986E-01-0.40984742E-04    3
 0.53076636E-08 0.17625613E-11-0.16031861E+05 0.25472212E+02                   4
mhp7*o    29/05/06      c   8h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10365763E+02 0.96658662E-01-0.41725994E-04 0.78767917E-08-0.54644543E-12    2
-0.69141859E+05 0.10711480E+03-0.35745937E+00 0.10660749E+00-0.77554687E-04    3
 0.21395978E-07 0.16336575E-11-0.75997500E+05 0.40893982E+02                   4
mhp7j*o    29/05/06     c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.72279239E+01 0.86201996E-01-0.35270521E-04 0.64120376E-08-0.43305916E-12    2
-0.52135340E+05 0.92285492E+02-0.98554157E-02 0.10522509E+00-0.84965897E-04    3
 0.31520614E-07-0.21908389E-11-0.58225422E+05 0.40319351E+02                   4
c2h4cho    29/05/06     c   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.38802774E+01 0.19560963E-01-0.65248419E-05 0.10275587E-08-0.62784000E-13    2
 0.26971973E+03 0.10725105E+02 0.30829394E+00 0.42721864E-01-0.48484926E-04    3
 0.31577844E-07-0.82415281E-11 0.24612408E+03 0.25079893E+02                   4
ch3coc2h4    29/05/06   c   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.14588371E+02 0.11932881E-01-0.28472325E-05 0.35024431E-09-0.17976966E-13    2
-0.10436764E+05-0.48007145E+02 0.16242706E+01 0.46672814E-01-0.44106699E-04    3
 0.27902210E-07-0.80798337E-11-0.63650942E+04 0.20266968E+02                   4
mhp7j6*o    29/05/06    c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.51898031E+01 0.84392361E-01-0.34631797E-04 0.63076122E-08-0.42649703E-12    2
-0.51182059E+05 0.78680923E+02-0.13321880E+01 0.11160109E+00-0.92342736E-04    3
 0.35418459E-07-0.30048407E-11-0.56169102E+05 0.44621166E+02                   4
mhp7j5*o    29/05/06    c   8h  13o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.18342747E+02 0.10601428E+00-0.45800287E-04 0.86511145E-08-0.60044504E-12    2
-0.44634406E+05 0.15422903E+03-0.18161272E+01 0.11867393E+00-0.11059207E-03    3
 0.49876693E-07-0.63979906E-11-0.55040473E+05 0.47510975E+02                   4
c7ald4oxo  29/05/06     c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mo        23/05/06      c   9h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.17790666E+01 0.92426240E-01-0.37587652E-04 0.68048287E-08-0.45826857E-12    2
-0.65513801E+05 0.57186504E+02-0.24077647E+01 0.12267257E+00-0.85769956E-04    3
 0.24118631E-07 0.68107358E-12-0.68503812E+05 0.49318127E+02                   4
momj      23/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.21430559E+01 0.81711859E-01-0.31436884E-04 0.54711564E-08-0.35820381E-12    2
-0.42309621E+05 0.38241669E+02-0.31637552E+01 0.13091597E+00-0.11197244E-03    3
 0.49020258E-07-0.73404850E-11-0.44250500E+05 0.53192684E+02                   4
```

```
mo2j      23/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.14161301E+01 0.83496340E-01-0.32428838E-04 0.56825376E-08-0.37389522E-12    2
-0.46085918E+05 0.39750984E+02-0.29214220E+01 0.12909919E+00-0.10748007E-03    3
 0.45228298E-07-0.62095698E-11-0.48252020E+05 0.49913494E+02                   4
mo3j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo4j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo5j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo6j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.18334340E+01 0.81609644E-01-0.31290496E-04 0.54333822E-08-0.35520520E-12    2
-0.42897453E+05 0.40274414E+02-0.32849281E+01 0.13271233E+00-0.11891003E-03    3
 0.56703833E-07-0.10054638E-10-0.45001652E+05 0.53672596E+02                   4
mo7j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.14487189E+01 0.82372539E-01-0.31699816E-04 0.55202944E-08-0.36169803E-12    2
-0.42799340E+05 0.42290497E+02-0.23825164E+01 0.12630865E+00-0.10471027E-03    3
 0.43890573E-07-0.58803266E-11-0.45088188E+05 0.49914421E+02                   4
mo8j      24/05/06      c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.21430559E+01 0.81711859E-01-0.31436884E-04 0.54711564E-08-0.35820381E-12    2
-0.41957363E+05 0.38241669E+02-0.31637552E+01 0.13091597E+00-0.11197244E-03    3
 0.49020258E-07-0.73404850E-11-0.43898242E+05 0.53192684E+02                   4
mhp7j     24/05/06      c   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.87399170E-01 0.75898319E-01-0.29505754E-04 0.51752189E-08-0.34081952E-12    2
-0.38438184E+05 0.47305195E+02-0.28603144E+01 0.11843847E+00-0.10347623E-03    3
 0.46138059E-07-0.69908341E-11-0.41014422E+05 0.50120590E+02                   4
mhx6j     24/05/06      c   7h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.15547460E+01 0.69381967E-01-0.27211119E-04 0.48027240E-08-0.31770512E-12    2
-0.35083844E+05 0.54057785E+02-0.26617866E+01 0.10671473E+00-0.96865195E-04    3
 0.45221036E-07-0.73678659E-11-0.38119703E+05 0.47488998E+02                   4
mpe5j     24/05/06      c   6h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.31604998E+01 0.62802054E-01-0.24874196E-04 0.44188231E-08-0.29354852E-12    2
-0.31745641E+05 0.60604359E+02-0.24634216E+01 0.94982199E-01-0.90206187E-04    3
 0.44228038E-07-0.77081223E-11-0.35224848E+05 0.44858868E+02                   4
oaoj      24/05/06      c   8h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49090858E+02 0.18508758E-02-0.60037735E-07 0.41440281E-12 0.70758472E-16    2
-0.60508773E+05-0.23452615E+03 0.20212417E+01 0.83619110E-01-0.35811991E-04    3
 0.52556227E-10 0.99690005E-12-0.42618359E+05 0.26460386E+02                   4
mo7d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.35566139E+00 0.84852763E-01-0.34587043E-04 0.62691745E-08-0.42242278E-12    2
-0.50782367E+05 0.49556068E+02-0.17868280E+01 0.11454793E+00-0.78740493E-04    3
 0.19759190E-07 0.18626116E-11-0.53310484E+05 0.46755840E+02                   4
mo6d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.11910077E+02 0.63574977E-01-0.23789020E-04 0.40636787E-08-0.26278610E-12    2
-0.57033414E+05-0.19272614E+02-0.19152652E+00 0.10652496E+00-0.68284025E-04    3
 0.16246911E-07 0.11500849E-11-0.54903516E+05 0.39205524E+02                   4
mo5d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.24260066E+01 0.79790533E-01-0.31941181E-04 0.57178360E-08-0.38195440E-12    2
-0.53351547E+05 0.33466812E+02-0.19614061E+01 0.11416736E+00-0.78591700E-04    3
 0.20840977E-07 0.10634274E-11-0.54672230E+05 0.47320042E+02                   4
mo4d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.24260066E+01 0.79790533E-01-0.31941181E-04 0.57178360E-08-0.38195440E-12    2
-0.53351547E+05 0.33466812E+02-0.19614061E+01 0.11416736E+00-0.78591700E-04    3
 0.20840977E-07 0.10634274E-11-0.54672230E+05 0.47320042E+02                   4
mo3d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.53543472E+02-0.92159994E-02 0.11456344E-04-0.30169143E-08 0.25174117E-12    2
-0.73902039E+05-0.25000227E+03 0.52355224E+00 0.82320824E-01-0.28386969E-04    3
-0.16632727E-08 0.58790771E-12-0.53775070E+05 0.44095951E+02                   4
mo2d      24/05/06      c   9h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.16953121E+00 0.82326099E-01-0.32999909E-04 0.59115428E-08-0.39502248E-12    2
-0.52731004E+05 0.46604263E+02-0.16706425E+01 0.11139970E+00-0.76697812E-04    3
 0.21219268E-07 0.66340623E-12-0.54900281E+05 0.46723911E+02                   4
mhp6d     24/05/06      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.22571309E+01 0.78844160E-01-0.32607102E-04 0.59716014E-08-0.40537167E-12    2
-0.47335234E+05 0.57728497E+02-0.16361413E+01 0.10314068E+00-0.72847564E-04    3
 0.19513047E-07 0.12650552E-11-0.50410445E+05 0.44331142E+02                   4
mhx5d     24/05/06      c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.39540703E+01 0.72504982E-01-0.30471969E-04 0.56443858E-08-0.38628706E-12    2
-0.43972320E+05 0.64749664E+02-0.12938293E+01 0.90416260E-01-0.63824511E-04    3
 0.16181136E-07 0.17447221E-11-0.47531074E+05 0.41093353E+02                   4
mpe4d     24/05/06      c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.56343269E+01 0.66171221E-01-0.28369999E-04 0.53298788E-08-0.36849460E-12    2
```

```
-0.40620254E+05 0.71663795E+02-0.11484917E+01 0.79075053E-01-0.58166061E-04    3
 0.16247890E-07 0.10083412E-11-0.44630855E+05 0.38687386E+02                   4
mb3d      24/05/06      c   5h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.28680710E+02-0.52132295E-02 0.66594753E-05-0.17697870E-08 0.14833187E-12    2
-0.51735703E+05-0.11966117E+03-0.76623303E+00 0.44696096E-01-0.13475134E-04    3
-0.26875515E-08 0.94983624E-12-0.40462742E+05 0.44014626E+02                   4
mp2d      24/05/06      c   4h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.11442745E+02 0.56594063E-01-0.25690231E-04 0.50260978E-08-0.35783082E-12    2
-0.33257324E+05 0.99588028E+02-0.41298971E+00 0.52523907E-01-0.42228967E-04    3
 0.13957491E-07 0.15500073E-12-0.39074504E+05 0.32631355E+02                   4
mo8oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.35980105E+01 0.87122373E-01-0.33787193E-04 0.59147984E-08-0.38893178E-12    2
-0.59385668E+05 0.35912323E+02-0.15787870E+01 0.13371134E+00-0.10109011E-03    3
 0.31698441E-07-0.36949678E-12-0.61518844E+05 0.50135460E+02                   4
mo7oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60281102E+05 0.57565117E+02-0.19428034E+01 0.13717867E+00-0.10570075E-03    3
 0.33110066E-07-0.23308690E-13-0.64066406E+05 0.50807755E+02                   4
mo6oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57563408E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489834E+02                   4
mo5oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562874E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489296E+02                   4
mo4oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562645E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50489067E+02                   4
mo3oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.37343296E+00 0.94427302E-01-0.37574624E-04 0.66974524E-08-0.44600681E-12    2
-0.60009496E+05 0.57562569E+02-0.18681483E+01 0.13666391E+00-0.10447211E-03    3
 0.31891286E-07 0.40556870E-12-0.63802699E+05 0.50488991E+02                   4
mo2oo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.45951244E+02 0.20701475E-01-0.43656855E-05 0.48959875E-09-0.23591824E-13    2
-0.78246141E+05-0.20343892E+03-0.37396055E+00 0.12454471E+00-0.80329410E-04    3
 0.19275163E-07-0.37104437E-12-0.63148215E+05 0.44527905E+02                   4
momoo     24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.51516218E+01 0.83369441E-01-0.31735457E-04 0.54841371E-08-0.35738516E-12    2
-0.63500832E+05 0.26123825E+02-0.52331142E+01 0.14590822E+00-0.11534456E-03    3
 0.37470183E-07-0.96269726E-12-0.64391238E+05 0.66614120E+02                   4
mo8ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo8ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo8ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46800480E+01 0.84129632E-01-0.32100757E-04 0.55554086E-08-0.36234457E-12    2
-0.53654809E+05 0.33587067E+02-0.15605955E+01 0.14286979E+00-0.13070260E-03    3
 0.61804975E-07-0.10572641E-10-0.55937293E+05 0.51059391E+02                   4
mo7ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53943406E+05 0.54096909E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57749656E+05 0.51312267E+02                   4
mo7ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo7ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo7ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54552602E+05 0.55814148E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58447262E+05 0.53912743E+02                   4
mo6ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53319406E+05 0.53403824E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57125656E+05 0.50619186E+02                   4
mo6ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
```

```
mo6ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo6ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo6ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh8j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.98544377E+00 0.91560103E-01-0.36025656E-04 0.63709931E-08-0.42192766E-12    2
-0.53319406E+05 0.53403824E+02-0.16548120E+01 0.14351310E+00-0.12591609E-03    3
 0.53087266E-07-0.66498378E-11-0.57125656E+05 0.50619186E+02                   4
mo5ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo5ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo5ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo5ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465891E+05 0.54748520E+02-0.13272338E+01 0.14110728E+00-0.12000381E-03    3
 0.47870905E-07-0.50123551E-11-0.61488648E+05 0.47020748E+02                   4
mo4ooh7j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo4ooh3j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.73329377E+00 0.91350392E-01-0.35812533E-04 0.63171433E-08-0.41761088E-12    2
-0.54280867E+05 0.55121063E+02-0.22768238E+01 0.14878616E+00-0.14120895E-03    3
 0.69111238E-07-0.12315069E-10-0.58175523E+05 0.53219662E+02                   4
mo4ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465785E+05 0.54762970E+02-0.13867182E+01 0.14151900E+00-0.12098959E-03    3
 0.48851280E-07-0.53580538E-11-0.61482277E+05 0.47286896E+02                   4
mo3ooh6j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.37281001E+00 0.92073835E-01-0.36201240E-04 0.63993779E-08-0.42371651E-12    2
-0.54193930E+05 0.56997993E+02-0.86064249E+00 0.13880545E+00-0.11838697E-03    3
 0.47667033E-07-0.50792942E-11-0.58316840E+05 0.47287640E+02                   4
mo3ooh2j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.29371378E+00 0.93303375E-01-0.37006932E-04 0.65815984E-08-0.43762463E-12    2
-0.57465785E+05 0.54762970E+02-0.13867182E+01 0.14151900E+00-0.12098959E-03    3
 0.48851280E-07-0.53580538E-11-0.61482277E+05 0.47286896E+02                   4
mo2ooh5j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03    3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2ooh4j  24/05/06      c   9h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46124687E+02 0.19641677E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13    2
```

```
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03   3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2ooh3j  24/05/06       c   9h  17o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.46124687E+02 0.19641627E-01-0.39754932E-05 0.43249501E-09-0.20428876E-13   2
-0.72211773E+05-0.20017470E+03-0.44013396E+00 0.13431138E+00-0.11145665E-03   3
 0.50941445E-07-0.11140653E-10-0.57557945E+05 0.46498322E+02                   4
mo2oohmj  24/05/06       c   9h  17o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.46503025E+02 0.19567983E-01-0.39896295E-05 0.43868473E-09-0.20998982E-13   2
-0.71641672E+05-0.20256317E+03-0.15821233E+00 0.13139309E+00-0.10180825E-03   3
 0.40538520E-07-0.74601480E-11-0.56823902E+05 0.45338642E+02                   4
momooh2j  24/05/06       c   9h  17o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.58239369E+01 0.82248792E-01-0.31178013E-04 0.53714713E-08-0.34927001E-12   2
-0.60961531E+05 0.23976868E+02-0.43981757E+01 0.14833368E+00-0.12605920E-03   3
 0.48663207E-07-0.46926161E-11-0.62109066E+05 0.62599686E+02                   4
mo8ooh7oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.29467473E+01 0.96120849E-01-0.37956248E-04 0.67306494E-08-0.44666899E-12   2
-0.70949086E+05 0.48242790E+02 0.15096016E-01 0.14576319E+00-0.11384734E-03   3
 0.34718074E-07 0.64080517E-12-0.74755922E+05 0.47196110E+02                   4
mo8ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12   2
-0.70974180E+05 0.47893349E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03   3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215572E+02                   4
mo8ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12   2
-0.70974180E+05 0.47893242E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03   3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215458E+02                   4
mo7ooh8oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.29467473E+01 0.96120849E-01-0.37956248E-04 0.67306494E-08-0.44666899E-12   2
-0.70949086E+05 0.48242989E+02 0.15096016E-01 0.14576319E+00-0.11384734E-03   3
 0.34718074E-07 0.64080517E-12-0.74755922E+05 0.47196308E+02                   4
mo7ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo7ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512329E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089092E+02                   4
mo7ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512329E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089092E+02                   4
mo6ooh8oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30093925E+01 0.96009701E-01-0.37891572E-04 0.67154797E-08-0.44543105E-12   2
-0.70974180E+05 0.47893486E+02 0.10373415E-01 0.14579800E+00-0.11393578E-03   3
 0.34810661E-07 0.60662743E-12-0.74755445E+05 0.47215710E+02                   4
mo6ooh7oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo6ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
```

```
mo5ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo5ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04   3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo4ooh7oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh6oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo4ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99195016E+05-0.31271356E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04   3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820564E+02                   4
mo3ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo3ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13744452E+01 0.10407012E+00-0.42102642E-04 0.75916429E-08-0.50966143E-12   2
-0.71715766E+05 0.72512451E+02-0.47333798E+00 0.15006417E+00-0.12037480E-03   3
 0.37945004E-07 0.38174357E-12-0.77289805E+05 0.49089211E+02                   4
mo3ooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99195016E+05-0.31202051E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04   3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.33513641E+02                   4
mo2ooh5oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99194828E+05-0.31201968E+03 0.31034703E+01 0.12628835E+00-0.76920333E-04   3
 0.16552155E-07-0.14650131E-11-0.76619188E+05 0.33959225E+02                   4
mo2ooh4oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99194828E+05-0.31201968E+03 0.31034703E+01 0.12628835E+00-0.76920333E-04   3
 0.16552155E-07-0.14650131E-11-0.76619188E+05 0.33959225E+02                   4
mo2ooh3oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.66494598E+02 0.10689219E-02 0.72668194E-09-0.46531446E-11 0.40031378E-15   2
-0.99195016E+05-0.31271368E+03 0.32083645E+01 0.12556818E+00-0.75207652E-04   3
 0.14858216E-07-0.87035831E-12-0.76630516E+05 0.32820442E+02                   4
mo2oohmoo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.82249975E+01 0.86596146E-01-0.33072454E-04 0.57288259E-08-0.37397657E-12   2
-0.75919445E+05 0.17837921E+02-0.46953363E+01 0.16008772E+00-0.12742764E-03   3
 0.38272756E-07 0.78343853E-12-0.76660641E+05 0.69637123E+02                   4
momooh2oo 24/05/06       c   9h  17o   6   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.82249975E+01 0.86596146E-01-0.33072454E-04 0.57288259E-08-0.37397657E-12   2
-0.75919406E+05 0.17143936E+02-0.47254734E+01 0.16029242E+00-0.12791003E-03   3
 0.38746261E-07 0.61823967E-12-0.76657344E+05 0.69071274E+02                   4
mo7ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.54960790E+01 0.10600425E+00-0.45038698E-04 0.84062837E-08-0.57840478E-12   2
-0.84955789E+05 0.91273170E+02-0.22201397E+00 0.13392125E+00-0.99631099E-04   3
 0.26486974E-07 0.25650137E-11-0.91139742E+05 0.47407669E+02                   4
mo6ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.95882120E+01 0.11257987E+00-0.48428621E-04 0.91196721E-08-0.63156826E-12   2
-0.83982211E+05 0.11385841E+03 0.73632115E+00 0.13247329E+00-0.10193008E-03   3
 0.30305809E-07 0.12726949E-11-0.92097023E+05 0.41858250E+02                   4
mo5ooh8*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.94011478E+01 0.11224698E+00-0.48424477E-04 0.90777830E-08-0.62826849E-12   2
-0.84055234E+05 0.11281860E+03 0.88079315E+00 0.13146219E+00-0.99486249E-04   3
 0.27860226E-07 0.21377080E-11-0.92112328E+05 0.41247841E+02                   4
mo8ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.95082121E+01 0.11150547E+00-0.47671056E-04 0.89378815E-08-0.61703946E-12   2
```

```
-0.84919836E+05 0.11345003E+03 0.16344066E+01 0.12721752E+00-0.95892952E-04   3
 0.28216830E-07 0.12864080E-11-0.93044945E+05 0.37976269E+02                   4
mo6ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.41200852E+01 0.10340482E+00-0.43625707E-04 0.81021811E-08-0.55550286E-12   2
-0.89182547E+05 0.82319649E+02-0.57328528E+00 0.13398756E+00-0.10003670E-03   3
 0.27948868E-07 0.17152752E-11-0.94632883E+05 0.48258713E+02                   4
mo5ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.78532286E+01 0.10932972E+00-0.46648998E-04 0.87330818E-08-0.60219473E-12   2
-0.88345797E+05 0.10361024E+03 0.68202120E+00 0.13049370E+00-0.97469383E-04   3
 0.26971458E-07 0.20957515E-11-0.95622094E+05 0.42143093E+02                   4
mo4ooh7*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.78532286E+01 0.10932972E+00-0.46648998E-04 0.87330818E-08-0.60219473E-12   2
-0.88345797E+05 0.10361024E+03 0.68202120E+00 0.13049370E+00-0.97469383E-04   3
 0.26971458E-07 0.20957515E-11-0.95622094E+05 0.42143093E+02                   4
mo8ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12   2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04   3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo7ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12   2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03   3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo5ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12   2
-0.83886016E+05 0.15954890E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03   3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50282253E+02                   4
mo4ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12   2
-0.83135531E+05 0.17977809E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03   3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.43896904E+02                   4
mo3ooh6*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12   2
-0.83135531E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03   3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.44589985E+02                   4
mo8ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17403215E+02 0.12547247E+00-0.55174180E-04 0.10552218E-07-0.73894569E-12   2
-0.82506438E+05 0.15748126E+03 0.68250346E+00 0.13083866E+00-0.99342898E-04   3
 0.27647943E-07 0.26296853E-11-0.93500000E+05 0.42726974E+02                   4
mo7ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12   2
-0.83407273E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03   3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.96035055E+05 0.44589985E+02                   4
mo6ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12   2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03   3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo4ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12   2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03   3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo3ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12   2
-0.83407273E+05 0.18047118E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03   3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.96035055E+05 0.44589985E+02                   4
mo2ooh5*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12   2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03   3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo7ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21525768E+02 0.13345858E+00-0.59658683E-04 0.11544376E-07-0.81533901E-12   2
-0.83135531E+05 0.17977809E+03 0.19994210E+00 0.13514057E+00-0.10599025E-03   3
 0.31124785E-07 0.22338320E-11-0.95763320E+05 0.43896904E+02                   4
mo6ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17684969E+02 0.12724406E+00-0.56405264E-04 0.10850080E-07-0.76301454E-12   2
-0.83996844E+05 0.15793864E+03-0.11488231E+01 0.13929427E+00-0.11017764E-03   3
 0.33759317E-07 0.12518428E-11-0.94764250E+05 0.50406845E+02                   4
mo3ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12   2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03   3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
mo2ooh4*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17975557E+02 0.12776323E+00-0.56689245E-04 0.10912220E-07-0.76777479E-12   2
-0.83886016E+05 0.16024199E+03-0.11189307E+01 0.13907109E+00-0.10959288E-03   3
 0.33117868E-07 0.15013140E-11-0.94767258E+05 0.50975327E+02                   4
```

```
mo6ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.20145365E+02 0.13134094E+00-0.58573514E-04 0.11315033E-07-0.79813369E-12   2
-0.85111406E+05 0.17207744E+03-0.22760024E+01 0.13957317E+00-0.10760363E-03   3
 0.30881012E-07 0.22776512E-11-0.96260164E+05 0.57632141E+02                   4
mo5ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.20145365E+02 0.13134094E+00-0.58573514E-04 0.11315033E-07-0.79813369E-12   2
-0.85111406E+05 0.17207744E+03-0.22760024E+01 0.13957317E+00-0.10760363E-03   3
 0.30881012E-07 0.22776512E-11-0.96260164E+05 0.57632141E+02                   4
mo4ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12   2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03   3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo2ooh3*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12   2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03   3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo5ooh2*o 24/05/06       c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12   2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03   3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo4ooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12   2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03   3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
mo3ooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.16420790E+02 0.12534058E+00-0.55436172E-04 0.10645584E-07-0.74766295E-12   2
-0.85930695E+05 0.15087718E+03-0.37133403E+01 0.14431414E+00-0.11312987E-03   3
 0.34777329E-07 0.87543324E-12-0.95251242E+05 0.64520844E+02                   4
momooh2*o  29/05/06      c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13   2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04   3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
mo2ooh*o 24/05/06        c   9h  16o   5   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.45763233E+02 0.23426952E-01-0.54769562E-05 0.66593681E-09-0.34039134E-13   2
-0.95895844E+05-0.20073366E+03 0.62433773E+00 0.12296082E+00-0.75140859E-04   3
 0.15162545E-07 0.73250471E-12-0.81080039E+05 0.41349030E+02                   4
mocy8o6  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12   2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04   3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy8o5  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.26874338E+02 0.14054599E+00-0.65425294E-04 0.13032252E-07-0.94011094E-12   2
-0.64983344E+05 0.19323114E+03-0.43543243E+01 0.14035048E+00-0.11182443E-03   3
 0.34362870E-07 0.13960118E-11-0.77739094E+05 0.53369232E+02                   4
mocy7o5  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12   2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04   3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy7o4  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.30665367E+02 0.14818263E+00-0.69889604E-04 0.14052839E-07-0.10207531E-11   2
-0.66054234E+05 0.21287505E+03-0.46974769E+01 0.14367707E+00-0.11610613E-03   3
 0.35454022E-07 0.18533020E-11-0.80288938E+05 0.53256794E+02                   4
mocy6o4  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12   2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04   3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy6o3  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.30665367E+02 0.14818263E+00-0.69889604E-04 0.14052839E-07-0.10207531E-11   2
-0.65782500E+05 0.21287505E+03-0.46974769E+01 0.14367707E+00-0.11610613E-03   3
 0.35454022E-07 0.18533020E-11-0.80017211E+05 0.53256794E+02                   4
mocy5o3  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12   2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04   3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy5o2  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.27323215E+02 0.14275895E+00-0.66992274E-04 0.13421326E-07-0.97226426E-12   2
-0.66437305E+05 0.19384650E+03-0.59087501E+01 0.14684899E+00-0.11785338E-03   3
 0.35560749E-07 0.18005568E-11-0.79032508E+05 0.59188107E+02                   4
mocy4o2  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12   2
-0.43238359E+05 0.10412209E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04   3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047073E+02                   4
mocy2om  30/05/06        c   9h  16o   3   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.21478661E+02 0.13002488E+00-0.59388556E-04 0.11669496E-07-0.83340702E-12   2
-0.69823938E+05 0.16074477E+03-0.87842989E+01 0.15273909E+00-0.12077823E-03   3
 0.33323197E-07 0.31567210E-11-0.79623625E+05 0.72820412E+02                   4
mhp7*o6*o 24/05/06       c   8h  12o   4   0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.35813737E+01 0.70903733E-01-0.28868621E-04 0.52286273E-08-0.35212274E-12   2
```

```
-0.84094453E+05 0.26783569E+02 0.51494056E+00 0.10360426E+00-0.74732103E-04    3
 0.19272008E-07 0.17387591E-11-0.86019484E-05 0.32993095E+02                   4
mhp7*o5*o  24/05/06     c   8h  12o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27326954E+02 0.12589554E+00 0.58685469E-04 0.11700639E-07-0.84460347E-12    2
-0.77571219E+05 0.20518336E+03-0.19825046E+01 0.11261459E+00-0.89498913E-04    3
 0.28100716E-07 0.11333910E-11-0.90499656E+05 0.52836594E+02                   4
mhp7*o4*o  24/05/06     c   8h  12o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28662657E+02 0.12795980E+00-0.59757946E-04 0.11930251E-07-0.86201592E-12    2
-0.75617734E+05 0.21262198E+03 0.53591490E+00 0.10789542E+00-0.87213477E-04    3
 0.27685866E-07 0.13195994E-11-0.90007500E+05 0.38920273E+02                   4
mhx6*o5*o  24/05/06     c   7h  10o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.17607889E+01 0.64756542E-01-0.26821468E-04 0.49181721E-08-0.33420594E-12    2
-0.80678617E+05 0.34505310E+02 0.90133715E+00 0.90572514E-01-0.64965636E-04    3
 0.15191349E-07 0.24862566E-11-0.83144812E+05 0.29568800E+02                   4
mhx6*o4*o  24/05/06     c   7h  10o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28524403E+02 0.11911192E+00-0.56631950E-04 0.11452694E-07-0.83539924E-12    2
-0.74476305E+05 0.20921518E+03-0.15762408E+01 0.99448055E-01-0.79418125E-04    3
 0.23717195E-07 0.19839983E-11-0.87627148E+05 0.49327797E+02                   4
mhx6*o3*o  24/05/06     c   7h  10o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.28524403E+02 0.11911192E+00-0.56631950E-04 0.11452694E-07-0.83539924E-12    2
-0.74476297E+05 0.20921518E+03-0.15762408E+01 0.99448055E-01-0.79418125E-04    3
 0.23717195E-07 0.19839983E-11-0.87627141E+05 0.49327797E+02                   4
mpe5*o4*o  24/05/06     c   6h   8o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.55639572E-01 0.58433972E-01-0.24689954E-04 0.45901998E-08-0.31494284E-12    2
-0.77313953E+05 0.41569912E+02 0.95344263E+00 0.79850294E-01-0.60724255E-04    3
 0.16603190E-07 0.12975738E-11-0.80234234E+05 0.27561476E+02                   4
mpe5*o3*o  24/05/06     c   6h   8o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
mpe5*o2*o  as mpe5*o3*o c   6h   8o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
mb4*o3*o  24/05/06     c   5h   6o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.20653464E+00 0.49957778E-01-0.21522896E-04 0.40570503E-08-0.28115048E-12    2
-0.75958836E+05 0.40554443E+02-0.13199506E+01 0.72539322E-01-0.55702723E-04    3
 0.15445821E-07 0.95270352E-12-0.77836883E+05 0.38649303E+02                   4
mb4*o2*o  as mpe5*o3*o c    5h   6o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27728111E+02 0.10917854E+00-0.52972213E-04 0.10870637E-07-0.80160536E-12    2
-0.73602852E+05 0.20211557E+03-0.38999507E+01 0.92510007E-01-0.75354968E-04    3
 0.23581141E-07 0.12547968E-11-0.85224734E+05 0.60625439E+02                   4
c5h11cocho  29/05/06    c   7h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
nc4h9cocho  29/05/06    c   6h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.18230997E+02 0.25888149E-01-0.82845845E-05 0.16280983E-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
c3h7cocho   29/05/06    c   5h   8o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
c6ald4oxo   29/05/06    c   6h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.12573102E+02 0.78058399E-01-0.34696928E-04 0.66868675E-08-0.47086434E-12    2
-0.39899977E+05 0.11103112E+03 0.14208453E+01 0.70562162E-01-0.50962513E-04    3
 0.15004934E-07 0.81338799E-12-0.47060309E+05 0.26899633E+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
c2h5cocho   29/05/06    c   4h   6o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
c5ald4oxo   29/05/06    c   5h   8o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
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
choc2h4cho  29/05/06    c   4h   6o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    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
choch2cho   29/05/06    c   3h   4o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66132860E+01 0.17330676E-01-0.64569190E-05 0.10991807E-08-0.70885829E-13    2
-0.36948453E+05-0.33510857E+01-0.24527216E-02 0.37944417E-01-0.31319421E-04    3
 0.14728886E-07-0.28633363E-11-0.35201020E+05 0.30321207E+02                   4
c7h15co     29/05/06    c   8h  15o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.11285434E+02 0.52986119E-01-0.18438002E-04 0.29914826E-08-0.18657219E-12    2
-0.23128758E+05-0.19043266E+02 0.46477064E+00 0.91447301E-01-0.62236912E-04    3
 0.21013266E-07-0.20767316E-11-0.21066465E+05 0.33600785E+02                   4
c5h11co     29/05/06    c   6h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.79615369E+01 0.39962973E-01-0.13805225E-04 0.22294031E-08-0.13865002E-12    2
-0.16395926E+05-0.52926483E+01 0.84059912E+00 0.68129607E-01-0.49279290E-04    3
 0.19393200E-07-0.28888231E-11-0.15274533E+05 0.28433727E+02                   4
c5h11cho    29/05/06    c   6h  12o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.57402120E+01 0.48000779E-01-0.18322138E-04 0.31731002E-08-0.20713903E-12    2
-0.33634195E+05 0.48293533E+01 0.36270306E+00 0.70419297E-01-0.44055785E-04    3
 0.11459334E-07 0.15832497E-12-0.33032711E+05 0.29570734E+02                   4
choch2cho   23/05/06    c   3h   4o   2   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66132860E+01 0.17330676E-01-0.64569190E-05 0.10991807E-08-0.70885829E-13    2
-0.36948453E+05-0.33510857E+01-0.24527216E-02 0.37944417E-01-0.31319421E-04    3
 0.14728886E-07-0.28633363E-11-0.35201020E+05 0.30321207E+02                   4
!*****************************************************************************
ch3cooch3   02/09/09 thergc     3h   6o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000   21
 0.88268805E+01 0.15117220E-01-0.49416144E-05 0.76787626E-09-0.46523871E-13    2
-0.30499422E+05-0.21477737E+02 0.12392817E+01 0.29657798E-01-0.13085829E-04    3
 0.18788593E-08 0.27925197E-13-0.27760008E+05 0.20078125E+02                   4
ch3cooch2   02/09/09 thergc     3h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000   21
 0.10552886E+02 0.10152706E-01-0.26200648E-05 0.34397976E-09-0.18599607E-13    2
-0.76800879E+04-0.29898724E+02 0.46317843E+00 0.35552453E-01-0.29664952E-04    3
 0.16530946E-07-0.44688185E-11-0.44319893E+04 0.23638107E+02                   4
c2h5cho     02/09/09 thergc     3h   6o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000   21
 0.64418173E+00 0.28732564E-01-0.11567317E-04 0.20789475E-08-0.13926759E-12    2
-0.23505053E+05 0.26040682E+02 0.11327065E+01 0.34011953E-01-0.21180662E-04    3
 0.55934000E-08 0.15802886E-12-0.24366895E+05 0.20947546E+02                   4
c2h5co      02/09/09 thergc     3h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1000.000   21
 0.29536858E+01 0.20463424E-01-0.68665886E-05 0.10863790E-08-0.66613795E-13    2
-0.62891992E+04 0.15442154E+02 0.16223680E+01 0.31646792E-01-0.26237274E-04    3
 0.13373604E-07-0.28386848E-11-0.66100625E+04 0.19737823E+02                   4
c5h9        1/14/99 thermc    5h   9   0   0g   300.000  5000.000 1392.000   21
 1.41860454e+01 2.07128899e-02-7.06960617e-06 1.09607133e-09-6.35322208e-14    2
 7.00496135e+03-5.14501773e+01-1.38013950e+00 5.57608487e-02-3.70143928e-05    3
 1.26883901e-08-1.78538835e-12 1.25589824e+04 3.26441304e+01                   4
c5h10-1     2/14/95 thermc    5h  10   0   0g   300.000  5000.000 1392.000   31
 1.45851539e+01 2.24072471e-02-7.63348025e-06 1.18188966e-09-6.84385139e-14    2
-1.00898205e+04-5.23683936e+01-1.06223481e+00 5.74218294e-02-3.74486890e-05    3
 1.27364989e-08-1.79609789e-12-4.46546666e+03 3.22739790e+01                   4
c5h10-2     2/14/95 thermc    5h  10   0   0g   300.000  5000.000 1389.000   31
 1.41109267e+01 2.28348272e-02-7.78626835e-06 1.20627491e-09-6.98795983e-14    2
-1.14336507e+04-5.01601163e+01-5.41560551e-01 5.39629918e-02-3.23508738e-05    3
 9.77416037e-09-1.18534668e-12-5.98606169e+03 2.97142748e+01                   4
ic5h12      7/29/99 thermc    5h  12   0   0g   300.000  5000.000 1390.000   41
 1.57973145e+01 2.62613369e-02-9.00865195e-06 1.40120752e-09-8.13944079e-14    2
-2.69072937e+04-6.15788664e+01-1.34131759e+00 6.31399950e-02-3.89549917e-05    3
 1.24066911e-08-1.64037258e-12-2.05560944e+04 3.17254941e+01                   4
ac5h11      7/29/99 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1389.000   41
 1.53818750e+01 2.41141042e-02-8.27847584e-06 1.28831856e-09-7.48649188e-14    2
-1.84296128e+03-5.64907641e+01-5.92409395e-01 5.86734947e-02-3.65981110e-05    3
 1.18412541e-08-1.59845819e-12 4.05970723e+03 3.04115490e+01                   4
bc5h11      7/29/99 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1378.000   41
 1.39073137e+01 2.54249890e-02-8.74289372e-06 1.36202712e-09-7.92041157e-14    2
-3.68387054e+03-4.79619044e+01 2.42901065e+00 4.24407315e-02-1.30562253e-05    3
-1.97621133e-09 1.29529180e-12 1.38326760e+03 1.73279484e+01                   4
cc5h11      7/29/99 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1384.000   41
 1.49694306e+01 2.41646361e-02-8.23351110e-06 1.27510885e-09-7.38548188e-14    2
-3.09681068e+03-5.37313735e+01-1.24027082e-01 5.36081314e-02-2.77532098e-05    3
 5.91091365e-09-2.25584142e-13 2.74445698e+03 2.94230230e+01                   4
dc5h11      7/29/99 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1389.000   41
 1.53818750e+01 2.41141042e-02-8.27847584e-06 1.28831856e-09-7.48649188e-14    2
-1.84296128e+03-5.64907641e+01-5.92409395e-01 5.86734947e-02-3.65981110e-05    3
 1.18412541e-08-1.59845819e-12 4.05970723e+03 3.04115490e+01                   4
ac5h10      2/14/95 thermc    5h  10   0   0g   300.000  5000.000 1391.000   31
 1.45614087e+01 2.25370538e-02-7.70100060e-06 1.19467870e-09-6.92704808e-14    2
-1.18004520e+04-5.30651959e+01-2.76630603e-01 5.53539280e-02-3.54499620e-05    3
 1.19626854e-08-1.69878242e-12-6.39547297e+03 2.73911578e+01                   4
bc5h10      2/14/95 thermc    5h  10   0   0g   300.000  5000.000 1385.000   31
 1.39945443e+01 2.29446582e-02-7.82594153e-06 1.21260230e-09-7.02518457e-14    2
-1.31576943e+04-5.04083848e+01 1.20274147e+00 4.78872107e-02-2.48144766e-05    3
 5.73514355e-09-3.91266685e-13-8.15212335e+03 2.01592579e+01                   4
cc5h10      2/14/95 thermc    5h  10   0   0g   300.000  5000.000 1393.000   31
 1.46491909e+01 2.25422061e-02-7.72053001e-06 1.19958604e-09-6.96317745e-14    2
-1.11652332e+04-5.42252285e+01-1.83685605e+00 6.07709466e-02-4.21592576e-05    3
 1.56103972e-08-2.43142766e-12-5.34864282e+03 3.45203543e+01                   4
ic5h9       2/14/95 thermc    5h   9   0   0g   300.000  5000.000 1385.000   31
 1.45682106e+01 2.05021258e-02-7.11493758e-06 1.11535314e-09-6.51460929e-14    2
 5.04089704e+03-5.46330888e+01-3.17594304e-01 5.22454910e-02-3.25968130e-05    3
 1.03628050e-08-1.36066533e-12 1.05922826e+04 2.65205225e+01                   4
nc5h12      1/14/95 thermc    5h  12   0   0g   300.000  5000.000 1390.000   41
 1.57257603e+01 2.61086045e-02-8.90970996e-06 1.38102248e-09-8.00296536e-14    2
-2.60519543e+04-6.03365457e+01-7.36766119e-01 6.07200973e-02-3.57592761e-05    3
 1.04907041e-08-1.21487315e-12-1.98934934e+04 2.95358286e+01                   4
c5h11-1     1/14/95 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1397.000   41
 1.53234740e+01 2.39041200e-02-8.14771619e-06 1.26176236e-09-7.30677335e-14    2
-9.23241637e+02-5.49528859e+01-9.05255912e-01 6.10632852e-02-4.09491825e-05    3
 1.46093470e-08-2.18859615e-12 4.83995303e+03 3.25574963e+01                   4
c5h11-2     1/14/95 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1377.000   41
 1.50998007e+01 2.37225333e-02-8.01388900e-06 1.23431039e-09-7.12300125e-14    2
-2.33420039e+03-5.29613979e+01 4.98943596e-01 5.09850184e-02-2.40687488e-05    3
 3.59465210e-09 3.01383099e-13 3.40702366e+03 2.78600953e+01                   4
c5h11-3     1/14/95 thermc    5h  11   0   0g   300.000  5000.000 1377.000   41
 1.50998007e+01 2.37225333e-02-8.01388900e-06 1.23431039e-09-7.12300125e-14    2
-2.33420039e+03-5.36508796e+01 4.98943596e-01 5.09850184e-02-2.40687488e-05    3
 3.59465210e-09 3.01383099e-13 3.40702366e+03 2.71706137e+01                   4
c2h5o       3/12/95 thermc    2h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1389.000   11
 7.87339772e+01 1.13070297e-02-3.84421421e-06 5.94414105e-10-3.43894538e-14    2
-6.07274953e+03-1.73416790e+01 4.94420708e-01 2.71774434e-02-1.65909010e-05    3
 5.15204200e-09-6.48496915e-13-3.35252925e+03 2.28079378e+01                   4
ch3o2       7/13/98 thermc    1h   3o   2   0g   300.000  5000.000 1385.000   11
 5.95787891e+00 7.90728626e-03-2.68246234e-06 4.13891337e-10-2.39007330e-14    2
-1.53574838e+03-4.71963886e+00 4.26146906e+00 1.00873599e-02-3.21506184e-06    3
 2.09409267e-10 4.18339103e-14-6.84394259e+02 5.16330320e+00                   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
ch3o2h      7/13/98 thermc    1h   4o   2   0g   300.000  5000.000 1390.000   21
 8.43117091e+00 8.06817909e-03-2.77094921e-06 4.31332243e-10-2.50692146e-14    2
-1.96678771e+04-9.91170629e+01 2.23442817e+00 1.90129767e-02-1.13386287e-05    3
 3.40306653e-09-4.11830222e-13-1.77197926e+04 9.25623949e+00                   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
c2h3o1,2  12/ 1/99 thermc    2h   3o   1   0g   300.000  5000.000 1492.000   01
 6.88486471E+00 6.94720501E-03-2.23214698E-06 3.32190767E-10-1.87124555E-14    2
 1.26442200E+04-1.23842570E+01-1.62965122E+00 2.93455486E-02-2.43737550E-05    3
 1.00522325E-08-1.61259036E-12 1.52459425E+04 3.22782741E+01                   4
c2h4o1,2  12/ 1/99 thermc    2h   4o   1   0g   300.000  5000.000 1399.000   01
 6.99485763E+00 1.00772459E-02-3.45220932E-06 5.36571216E-10-3.11563543E-14    2
-1.04091344E+04-1.59857976E+01-1.44361790E+00 2.91837107E-02-1.96805054E-05    3
 6.67472575E-09 1.02139342E-13-7.43433507E+03 2.95212453E+01                   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
o2c2h4oh    2/14/95 thermc    2h   5o   3   0g   300.000  5000.000 1392.000   31
 1.07432659e+01 1.30957787e-02-4.45370088e-06 6.88548738e-10-3.98230113e-14    2
-2.55911274e+04-2.33254953e+01 4.11839445e+00 2.72240632e-02-1.60824430e-05    3
 5.17033408e-09-7.31610168e-13-2.30857785e+04 1.28482112e+01                   4
ch2o2h      3/27/97 thermc    1h   3o   2   0g   300.000  5000.000 1387.000   21
 9.11485569e+00 5.08455401e-03-1.77434554e-06 2.79202873e-10-1.63513161e-14    2
 3.77183263e+03-2.03682592e-01 4.59149302e+00 1.53929093e-02-1.08252672e-05    3
 3.94840151e-09-5.98062430e-13 5.38276049e+03 4.04080670e+00                   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
 1.19869814E-08-1.96202348E-12-4.04609764E+04 1.52535301E+01                   4
c2h3co      6/26/95 thermc    3h   3o   1   0g   300.000  5000.000 1393.000   11
 9.99505311e+00 7.34623223e-03-2.56370222e-06 4.03462270e-10-2.36317330e-14    2
 4.00522160e+03-2.67674022e+01 1.05143589e+00 3.06932973e-02-2.65560368e-05    3
 1.18183987e-08-2.11589812e-12 6.87879551e+03 2.04173489e+01                   4
c2h3cho     6/26/95 thermc    3h   4o   1   0g   300.000  5000.000 1393.000   11
 1.04184959e+01 4.48963321e-03-3.29310529e-06 5.16279203e-10-3.01587291e-14    2
-1.49630281e+04-3.07235061e+01 2.92355162e-01 3.54321417e-02-2.94936324e-05    3
 1.28100124e-08-2.26144108e-12-1.16521584e+04 2.28878280e+01                   4
c3h5o       7/20/95 thermc    3h   5o   1   0g   300.000  5000.000 1380.000   11
 1.02551752e+01 1.14983720e-02-3.84645659e-06 5.88910346e-10-3.38557923e-14    2
 6.26560810e+03-2.77655042e+01 1.19822582e+00 3.05579837e-02-1.80630276e-05    3
 4.86150033e-09-4.19854562e-13 9.58217784e+03 2.15566221e+01                   4
prooh1-2    7/27/98   trmc    3h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1381.000   41
 1.43342402e+01 1.50496617e-02-5.20515993e-06 8.14227552e-10-4.74899437e-14    2
-6.33723421e+03-4.47976591e+01 4.08359443e+00 3.40422329e-02-1.62692689e-05    3
 2.38765400e-09 2.21650818e-13-2.27965073e+03 1.20159683e+01                   4
prooh1-3    7/27/98   trmc    3h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.45796713e+01 1.48373142e-02-5.13088443e-06 8.02513899e-10-4.68026484e-14    2
-5.08733997e+03-4.60293044e+01 3.02841453e+00 3.90993062e-02-2.35990175e-05    3
 6.75244193e-09-7.05929372e-13-7.99302348e+02 1.69822279e+01                   4
prooh2-1    7/27/98   trmc    3h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1395.000   41
 1.48333794e+01 1.45208404e-02-4.99887477e-06 7.79489590e-10-4.53629117e-14    2
-7.24052565e+03-4.92810904e+01 2.33885419e+00 4.35977621e-02-3.09323192e-05    3
 1.13505578e-08-1.70839946e-12-2.88672352e+03 1.78673585e+01                   4
prooh1-2o2  7/27/98   trmc    3h   7o   4   0g   300.000  5000.000 1395.000   51
 1.80081026e+01 1.64454957e-02-5.65072684e-06 8.79909715e-10-5.11539524e-14    2
-2.62531859e+04-5.96854123e+01 5.12908753e+00 4.65555698e-02-3.29168914e-05    3
 1.22946656e-08-1.91321521e-12-2.17507893e+04 9.52747117e+00                   4
prooh1-3o2  7/27/98   trmc    3h   7o   4   0g   300.000  5000.000 1389.000   51
 1.76575084e+01 1.68408710e-02-5.80897250e-06 9.06908390e-10-5.28196158e-14    2
-2.40466946e+04-5.64544124e+01 6.00880390e+00 4.14199787e-02-2.50067314e-05    3
 7.50165917e-09-9.60293044e-13 1.02841453e+04 7.10905621e+00                   4
prooh2-1o2  7/27/98   trmc    3h   7o   4   0g   300.000  5000.000 1395.000   51
 1.80081026e+01 1.64454957e-02-5.65072684e-06 8.79909715e-10-5.11539524e-14    2
-2.62531859e+04-5.96854123e+01 5.12908753e+00 4.65555698e-02-3.29168914e-05    3
 1.22946656e-08-1.91321521e-12-2.17507893e+04 9.52747117e+00                   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
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 3.31118928e-02-3.10631817e-05    3
 1.20668364e-08-1.97214967e-12-8.44902998e+03 2.57650010e+01                   4
nc3h7o2h    7/27/98   trmc    3h   8o   2   0g   300.000  5000.000 1390.000   41
 1.47017550e+01 1.71731699e-02-5.91205329e-06 9.21842570e-10-5.36438880e-14    2
-2.99988556e+04-4.93387892e+01 2.34710908e+00 4.34517484e-02-2.65357553e-05    3
 7.98979513e-09-9.39626069e-13-2.54265832e+04 1.79683851e+01                   4
ic3h7o2h    7/27/98   trmc    3h   8o   2   0g   300.000  5000.000 1395.000   41
 1.52679302e+01 1.66755420e-02-5.73697213e-06 8.94179760e-10-5.20203878e-14    2
-3.23350162e+04-5.46073712e+01 1.35451871e+00 4.88198242e-02-3.41581982e-05    3
 1.23687062e-08-1.83952710e-12-2.74590899e+04 2.02567127e+01                   4
nc3h7o2     7/27/98   trmc    3h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1387.000   31
 1.23635662e+01 1.69377420e-02-5.80705297e-06 9.02805946e-10-5.24229836e-14    2
-1.19482794e+04-3.57854035e+01 3.15306348e+00 3.52691052e-02-1.90649122e-05    3
 5.01988837e-09-5.10606304e-13-8.35295454e+03 1.49406763e+01                   4
ic3h7o2     7/27/98   trmc    3h   7o   2   0g   300.000  5000.000 1394.000   31
 1.27059050e+01 1.65446528e-02-5.64857588e-06 8.75666817e-10-5.07449775e-14    2
-1.41513305e+04-3.96629320e+01 2.25116181e+00 4.04764261e-02-2.70779685e-05    3
 9.87383732e-09-1.54391980e-12-1.04027797e+04 1.67736536e+01                   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
ic4h8o      7/19/95 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1399.000   21
 1.44624830e+01 1.80562860e-02-6.18008791e-06 9.59941341e-10-5.57132297e-14    2
-2.30230616e+04-5.61190165e+01-2.97373741e+00 6.24618637e-02-5.04348211e-05    3
 2.13345360e-08-3.67382824e-12-1.73274318e+04 3.62336362e+01                   4
ic4h8oh     2/14/95 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1376.000   41
 1.25605997e+01 2.10647488e-02-7.15019648e-06 1.10439262e-09-6.38428695e-14    2
-1.86203249e+04-3.67889430e+01 3.29612707e+00 3.47649647e-02-1.02505618e-05    3
-2.04641931e-09 1.18879408e-12-1.45627247e+04 1.58606320e+01                   4
io2c4h8oh   8/23/95 thermc    4h   9o   3   0g   300.000  5000.000 1395.000   51
 1.79798208e+01 2.13452115e-02-7.29108198e-06 1.13068846e-09-6.55402236e-14    2
-3.85769917e+04-6.23553522e+01 2.88826008e+00 5.80363124e-02-4.26690874e-05    3
 1.71759332e-08-2.91842186e-12-3.33881503e+04 1.83381149e+01                   4
ic4h7o      4/ 9/91     c   4h   7o   1   0g   300.000  5000.000 1403.000   21
```

```
 9.48417671e+00 1.31009062e-02-4.32434648e-06 8.02040394e-10-5.63147904e-14    2
-1.02173544e-02-3.41947251e+01 1.32646878e+00 3.15163503e-02-2.06543720e-05    3
 7.62311192e-09-1.18481939e-12 2.87093070e+03 9.96818073e+00                   4
c4h7to     12/ 1/99 thermc    4h   7o   1   0g   300.000  5000.000 2017.000   41
 1.22411698e+01 2.14192799e-02-7.36540176e-06 1.15346865e-09-6.74843941e-12    2
-1.59314041e+04-3.35659613e+01 8.93729480e-01 4.56458552e-02-2.50918881e-05    3
 6.24130181e-09-4.99533512e-13-1.20051696e+04 2.78453352e+01                   4
c4h8oh-2   2/14/95 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1390.000   41
 1.40098964e+01 1.96303998e-02-6.61483807e-06 1.01686276e-09-5.85950747e-14    2
-1.90865900e+04-4.50052542e+01 7.34225848e-01 4.82233506e-02-2.92566110e-05    3
 8.78396067e-09-1.01812519e-12-1.42394556e+04 2.71427693e+01                   4
o2c4h8oh-1 6/26/95 thermc    4h   9o   3   0g   300.000  5000.000 1396.000   51
 1.74383247e+01 2.16778876e-02-7.37772628e-06 1.14128811e-09-6.60391451e-14    2
-3.55892620e+04-5.71247140e+01 2.88497398e+00 5.63287929e-02-3.98403503e-05    3
 1.53891643e-08-2.51940787e-12-3.05246721e+04 2.09293355e+01                   4
o2c4h8oh-2 6/26/95 thermc    4h   9o   3   0g   300.000  5000.000 1399.000   51
 1.82942871e+01 2.09395389e-02-7.12096934e-06 1.10103094e-09-6.36889768e-14    2
-3.80505855e+04-6.29154326e+01 2.10003504e+00 6.17528218e-02-4.77238541e-05    3
 1.99145784e-08-3.44416275e-12-3.26698755e+04 2.30901271e+01                   4
c4h8ooh1-2o2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.11658891e+01 2.09636033e-02-7.20558874e-06 1.12228133e-09-6.52546797e-14    2
-3.03479380e+04-7.52165802e+01 5.01285046e+00 5.83017270e-02-4.05195371e-05    3
 1.48315962e-08-2.26233460e-12-2.46570201e+04 1.17446314e+01                   4
c4h8ooh1-4o2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1390.000   61
 2.08113157e+01 2.13659225e-02-7.36701751e-06 1.14985884e-09-6.69573614e-14    2
-2.81433909e+04-7.19710855e+01 5.83366690e+00 5.33790803e-02-3.28995535e-05    3
 1.02114554e-08-1.27916669e-12-2.25926378e+04 9.60975931e+00                   4
c4h8ooh2-1o2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.11658891e+01 2.09636033e-02-7.20558874e-06 1.12228133e-09-6.52546797e-14    2
-3.03479380e+04-7.52165802e+01 5.01285046e+00 5.83017270e-02-4.05195371e-05    3
 1.48315962e-08-2.26233460e-12-2.46570201e+04 1.17446314e+01                   4
c4h8ooh2-3o2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1398.000   61
 2.15217825e+01 2.05579475e-02-7.04261632e-06 1.09442954e-09-6.35349139e-14    2
-3.25566688e+04-7.84828141e+01 4.11559239e+00 6.34981936e-02-4.85051093e-05    3
 1.96624863e-08-3.28974080e-12-2.67080460e+04 1.42409538e+01                   4
c4h8ooh2-4o2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.11658891e+01 2.09636033e-02-7.20558874e-06 1.12228133e-09-6.52546797e-14    2
-3.03479380e+04-7.52165802e+01 5.01285046e+00 5.83017270e-02-4.05195371e-05    3
 1.48315962e-08-2.26233460e-12-2.46570201e+04 1.17446314e+01                   4
tc4h8ooh-io2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1398.000   61
 2.13449367e+01 2.06730377e-02-7.07392965e-06 1.09839429e-09-6.37268510e-14    2
-3.20252163e+04-7.79725721e+01 4.68534433e+00 6.18101860e-02-4.70007436e-05    3
 1.91369663e-08-3.23228649e-12-2.64124548e+04 1.07933803e+01                   4
ic4h8ooh-io2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.10067752e+01 2.11871430e-02-7.30278523e-06 1.13958704e-09-6.63500092e-14    2
-2.93623969e+04-7.44869569e+01 5.11703412e+00 5.63219760e-02-3.67060538e-05    3
 1.22740283e-08-1.68476794e-12-2.36073583e+04 1.16184184e+01                   4
ic4h8ooh-to2 7/27/98 trmc    4h   9o   4   0g   300.000  5000.000 1398.000   61
 2.13449367e+01 2.06730377e-02-7.07392965e-06 1.09839429e-09-6.37268510e-14    2
-3.20252163e+04-7.79725721e+01 4.68534433e+00 6.18101860e-02-4.70007436e-05    3
 1.91369663e-08-3.23228649e-12-2.64124548e+04 1.07933803e+01                   4
c4h8ooh1-2 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1379.000   51
 1.67765697e+01 2.02436108e-02-7.00755314e-06 1.09668146e-09-6.39812135e-14    2
-1.01952999e+04-5.57317121e+01 4.58873307e+00 4.21293468e-02-1.91956104e-05    3
 2.59922321e-09 2.80120772e-13-5.24542343e+03 1.21592799e+01                   4
c4h8ooh1-3 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 2021.000   51
 1.56428727e+01 2.11527368e-02-7.38808963e-06 1.16936828e-09-6.89245122e-14    2
-9.36522030e+03-4.85929362e+01 2.78455585e+00 4.88189773e-02-2.78981669e-05    3
 7.20477548e-09-6.14607480e-13-4.93663384e+03 2.09179383e+01                   4
c4h8ooh1-4 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1389.000   51
 1.77133049e+01 1.93745922e-02-6.69206220e-06 1.04584044e-09-6.09577259e-14    2
-9.17554473e+03-6.14282420e+01 2.80493082e+00 5.12607474e-02-3.18525021e-05    3
 9.70972499e-09-1.15079001e-12-3.68732966e+03 1.97101531e+01                   4
c4h8ooh2-1 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1394.000   51
 1.80573255e+01 1.89866843e-02-6.53684979e-06 1.01936596e-09-5.93247307e-14    2
-1.13814169e+04-6.46252524e+01 1.95091189e+00 5.62506160e-02-3.95335509e-05    3
 1.43603629e-08-2.14037362e-12-5.74431815e+03 2.20166148e+01                   4
c4h8ooh2-3 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1380.000   51
 1.80170260e+01 1.81193762e-02-6.05726750e-06 9.27163125e-10-5.32982002e-14    2
-1.27145729e+04-6.37711673e+01 2.34686251e+00 5.15123717e-02-3.12674730e-05    3
 8.58597815e-09-7.50843894e-13-7.04771457e+03 2.13675610e+01                   4
c4h8ooh2-4 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1394.000   51
 1.80573255e+01 1.89866843e-02-6.53684979e-06 1.01936596e-09-5.93247307e-14    2
-1.13814169e+04-6.46252524e+01 1.95091189e+00 5.62506160e-02-3.95335509e-05    3
 1.43603629e-08-2.14037362e-12-5.74431815e+03 2.20166148e+01                   4
ic4h8ooh-i 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1391.000   51
 1.78711969e+01 1.92245013e-02-6.63698748e-06 1.03691898e-09-6.04257293e-14    2
-1.03794758e+04-6.37261227e+01 2.14188719e+00 5.39276766e-02-3.52919112e-05    3
 1.15707492e-08-1.51619803e-12-4.70862582e+03 2.14811474e+01                   4
ic4h8ooh-t 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1681.000   51
 1.44876346e+01 2.33434859e-02-8.40802842e-06 1.35589067e-09-8.08795065e-14    2
-1.12346112e+04-4.43708727e+01 4.65203922e+00 3.99032801e-02-1.49024710e-05    3
 4.11913477e-11 7.45097887e-13-7.40781120e+03 1.04511804e+01                   4
tc4h8ooh-i 7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   51
 1.76298001e+01 1.91431043e-02-6.54283283e-06 1.01512413e-09-5.88626474e-14    2
-1.27363222e+04-6.34178921e+01 2.39936083e+00 5.71587455e-02-4.40222592e-05    3
 1.82621519e-08-3.14498273e-12-7.63231691e+03 1.76114460e+01                   4
c4h8o1-2   12/ 1/99 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1399.000   21
 1.39197290E+01 1.85551492E-02-6.36014179E-06 9.88844645E-10-5.74274779E-14    2
-2.09452548E+04-5.06788231E+01-2.42033073E+00 5.79308508E-02-4.30236499E-05    3
 1.66679793E-08-2.64714350E-12-1.53950880E+04 3.66425242E+01                   4
c4h8o1-3   1/22/95 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1371.000   51
 1.54227092e+01 1.70211052e-02-6.06347951e-06 9.67354762e-10-5.71992419e-14    2
-2.20194174e+04-6.13871862e+01-2.53690104e+00 5.43995707e-02-3.43390305e-05    3
 1.01079922e-08-1.10262736e-12-1.52980680e+04 3.67400719e+01                   4
c4h8o1-4   1/22/95 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1361.000   51
 1.42360731e+01 1.81176105e-02-6.46263809e-06 1.03194372e-09-6.10557331e-14    2
-2.99478670e+04-5.52081041e+01-3.28505561e+00 5.04800902e-02-2.51998984e-05    3
 3.65743744e-09 3.94863161e-13-2.30067422e+04 4.19349253e+01                   4
c4h8o2-3   1/22/95 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1384.000   51
 1.58263859e+01 1.64400938e-02-5.80680311e-06 9.21146000e-10-5.42511002e-14    2
-2.35334573e+04-6.34844562e+01-2.98701197e+00 6.32678880e-02-5.20855777e-05    3
 2.24064364e-08-3.95416618e-12-1.71957196e+04 3.66920390e+01                   4
cc4h8o     6/29/95 thermc    4h   8o   1   0g   300.000  5000.000 1401.000   11
 1.35131704e+01 1.91666441e-02-6.53902359e-06 1.01366570e-09-5.87546671e-14    2
-2.00311488e+04-5.22146967e+01-5.27768230e+00 6.52482242e-02-5.00209030e-05    3
 1.97452179e-08-3.15605813e-12-1.37706522e+04 4.78500688e+01                   4
pc4h9o     4/ 7/97 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1391.000   31
 1.41640700e+01 2.03187624e-02-6.93511083e-06 1.07513672e-09-6.23127410e-14    2
-1.42420601e+04-4.82367401e+01 9.67540651e-02 5.13775042e-02-3.29032720e-05    3
 1.09105103e-08-1.49433137e-12-9.13869802e+03 2.80158934e+01                   4
sc4h9o     4/ 7/97 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1395.000   31
 1.46375083e+01 2.00247645e-02-6.85591556e-06 1.06495531e-09-6.18039602e-14    2
-1.65482450e+04-5.11373031e+01-2.83357719e-01 5.51677601e-02-3.90934494e-05    3
 1.48025000e-08-2.34914774e-12-1.13457261e+04 2.89769292e+01                   4
ic4h9o     4/ 7/97 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1393.000   31
 1.44410211e+01 2.00236384e-02-6.82123481e-06 1.05619664e-09-6.11656749e-14    2
-1.54938047e+04-5.12226534e+01-7.35144480e-01 5.47496858e-02-3.71858986e-05    3
 1.31728314e-08-1.92762149e-12-1.01343076e+04 3.05677183e+01                   4
tc4h9o     4/ 7/97 thermc    4h   9o   1   0g   300.000  5000.000 1394.000   31
 1.50398978e+01 1.96255848e-02-6.70664280e-06 1.04053823e-09-6.03398342e-14    2
-1.90243904e+04-5.66523938e+01-7.70464068e-01 5.81926660e-02-4.36197921e-05    3
 1.74942219e-08-2.91836040e-12-1.36502805e+04 2.77576513e+01                   4
pc4h9o2h   7/27/98 thermc    4h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1391.000   51
 1.78679345e+01 2.16721671e-02-7.45776232e-06 1.16252597e-09-6.76360427e-14    2
-3.40961281e+04-6.49157086e+01 2.18923238e+00 5.53615306e-02-3.43606462e-05    3
 1.06491973e-08-1.31282811e-12-2.83259389e+04 2.03828500e+01                   4
sc4h9o2h   7/27/98 thermc    4h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1394.000   51
 1.84587365e+01 2.11540972e-02-7.27580288e-06 1.13381301e-09-6.59525181e-14    2
-3.64437927e+04-6.96404460e+01 1.20226203e+00 6.06883265e-02-4.18581136e-05    3
 1.49207978e-08-2.18449509e-12-3.03591918e+04 2.33362838e+01                   4
ic4h9o2h   7/27/98 thermc    4h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1393.000   51
 1.80638596e+01 2.14952041e-02-7.39466599e-06 1.15248604e-09-6.70444445e-14    2
-3.53177958e+04-6.74453610e+01 1.42174164e+00 5.84962618e-02-3.84274170e-05    3
 1.28642780e-08-1.75089157e-12-2.93320091e+04 2.26293338e+01                   4
tc4h9o2h   7/27/98 thermc    4h  10o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   51
 1.84307603e+01 2.10260216e-02-7.19660716e-06 1.11769066e-09-6.48580182e-14    2
-3.80140174e+04-7.22420313e+01 8.09246550e-01 6.47750684e-02-4.98536374e-05    3
 2.04515370e-08-3.46702253e-12-3.21096928e+04 2.15508632e+01                   4
tc4h9o2    7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1396.000   41
 1.59774417e+01 2.08309002e-02-7.09253895e-06 1.09742829e-09-6.35096203e-14    2
-1.98907380e+04-5.79631674e+01 1.67446795e+00 5.64608009e-02-4.25138936e-05    3
 1.76742614e-08-3.09279975e-12-1.50470809e+04 1.82289521e+01                   4
ic4h9o2    7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1390.000   41
 1.56194609e+01 2.13729185e-02-7.33347201e-06 1.14076119e-09-6.62677067e-14    2
-1.72271614e+04-5.32860068e+01 2.16441645e+00 5.06259009e-02-3.16734589e-05    3
 1.04781724e-08-1.47428175e-12-1.22481418e+04 1.98960662e+01                   4
sc4h9o2    7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1393.000   41
```

```
 1.59125079e+01 2.10170750e-02-7.18695542e-06 1.11540718e-09-6.46906625e-14    2
-1.82703158e+04-5.47955211e+01 2.12203459e+00 5.22170099e-02-3.45361525e-05    3
 1.22590593e-08-1.85024171e-12-1.33059163e+04 1.97502350e+01                   4
pc4h9o2    7/27/98 thermc    4h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.55697813e+01 2.14098453e-02-7.34517126e-06 1.14248918e-09-6.63646622e-14    2
-1.60672005e+04-5.16056477e+01 3.00751292e+00 4.70763532e-02-2.66182332e-05    3
 7.46167798e-09-8.28942632e-13-1.12534231e+04 1.73052261e+01                   4
acetoo2    2/14/95    c   3h   5o   3   0g   300.000  5000.000 1379.000   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
acetoo2h   2/14/95    c   3h   6o   3   0g   300.000  5000.000 1381.000   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
acetoo     2/14/95    c   3h   5o   2   0g   300.000  5000.000 1499.000   21
 1.82170188e+01 8.06718056e-03-2.92701772e-06 4.72700225e-10-2.81887496e-14    2
-1.76096923e+04-6.45576662e+01 4.18402754e+00 3.73903061e-02-2.37974482e-05    3
 5.85701585e-09-2.58380150e-13-1.25344087e+04 1.17972181e+01                   4
neoc5ketox 7/13/98 thermc    5h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   41
 2.02085594e+01 1.98922444e-02-6.80238854e-06 1.05642957e-09-6.13207764e-14    2
-3.07573603e+04-7.91464968e+01-1.28848119e+00 7.23078481e-02-5.57421308e-05    3
 2.18319155e-08-3.43735834e-12-2.35865907e+04 3.54017618e+01                   4
neoc5kejol 7/13/98 thermc    5h   9o   2   0g   300.000  5000.000 1398.000   51
 1.98786165e+01 1.96143658e-02-6.67699815e-06 1.03377708e-09-5.98769869e-14    2
-3.80886649e+04-7.56009507e+01-5.89078395e-01 6.96251860e-02-5.34739597e-05    3
 2.09396311e-08-3.29975554e-12-3.12734877e+04 3.34219207e+01                   4
ac5h11o2   7/27/98 thermc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1391.000   51
 1.87723169e+01 2.58734369e-02-8.87754357e-06 1.38096424e-09-8.02228125e-14    2
-2.13172355e+04-6.80913500e+01 2.05560022e+00 6.22881314e-02-3.91279410e-05    3
 1.29046826e-08-1.79508942e-12-1.51539589e+04 2.27797841e+01                   4
bc5h11o2   7/27/98 thermc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1396.000   51
 1.91295420e+01 2.53402102e-02-8.64145541e-06 1.33857703e-09-7.75274769e-14    2
-2.39840449e+04-7.23643566e+01 1.57535378e+00 6.80558996e-02-4.98515714e-05    3
 2.00286649e-08-3.39858340e-12-1.79537035e+04 2.14804724e+01                   4
cc5h11o2   7/27/98 thermc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1394.000   51
 1.91350718e+01 2.54629309e-02-8.71307443e-06 1.35289404e-09-7.84908460e-14    2
-2.35260442e+04-7.20761307e+01 1.18043599e+00 6.74377074e-02-4.70628975e-05    3
 1.77082318e-08-2.81674660e-12-1.72097852e+04 2.44796226e+01                   4
dc5h11o2   7/27/98 thermc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1391.000   51
 1.87723169e+01 2.58734369e-02-8.87754357e-06 1.38096424e-09-8.02228125e-14    2
-2.13172355e+04-6.87808316e+01 2.05560022e+00 6.22881314e-02-3.91279410e-05    3
 1.29046826e-08-1.79508942e-12-1.51539589e+04 2.20903025e+01                   4
ac5h11o2h  7/27/98 thermc    5h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.12188295e+01 2.60552441e-02-8.97276582e-06 1.39940062e-09-8.14468059e-14    2
-3.94301565e+04-8.23139702e+01 1.16355888e+00 7.07593246e-02-4.67430258e-05    3
 1.58549453e-08-2.20595318e-12-3.22134413e+04 2.62184991e+01                   4
bc5h11o2h  7/27/98 thermc    5h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   61
 2.15791630e+01 2.55293792e-02-8.74144557e-06 1.35799093e-09-7.88178635e-14    2
-4.21018763e+04-8.66131270e+01 6.92975728e-01 7.64716667e-02-5.73697195e-05    3
 2.29205016e-08-3.79776311e-12-3.50143500e+04 2.48768398e+01                   4
cc5h11o2h  7/27/98 thermc    5h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1396.000   61
 2.15815140e+01 2.56468986e-02-8.80951469e-06 1.37157037e-09-7.97308458e-14    2
-4.16399733e+04-8.63007230e+01 2.82757066e-01 7.59262672e-02-5.46987516e-05    3
 2.06710545e-08-3.23053730e-12-3.42681986e+04 2.79460985e+01                   4
dc5h11o2h  7/27/98 thermc    5h  12o   2   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.12188295e+01 2.60552441e-02-8.97276582e-06 1.39940062e-09-8.14468059e-14    2
-3.94301565e+04-8.30034541e+01 1.16355888e+00 7.07593246e-02-4.67430258e-05    3
 1.58549453e-08-2.20595318e-12-3.22134413e+04 2.55290175e+01                   4
ac5h11o    4/ 7/97 thermc    5h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1393.000   41
 1.75869049e+01 2.45367427e-02-8.37092452e-06 1.29739442e-09-7.51829993e-14    2
-1.95805248e+04-6.59883636e+01-9.19732265e-01 6.67848684e-02-4.52387295e-05    3
 1.59896239e-08-2.33753316e-12-1.30295529e+04 3.37952790e+01                   4
bc5h11o    4/ 7/97 thermc    5h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1394.000   41
 1.82069801e+01 2.41156964e-02-8.24753836e-06 1.28029203e-09-7.42707701e-14    2
-2.31211937e+04-7.15376167e+01-9.58911487e-01 7.02275401e-02-5.16299649e-05    3
 2.02646116e-08-3.31507815e-12-1.65446528e+04 3.10108152e+01                   4
cc5h11o    4/ 7/97 thermc    5h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1394.000   41
 1.79690528e+01 2.45047519e-02-8.42212090e-06 1.31167041e-09-7.62623929e-14    2
-2.18981212e+04-6.91606112e+01-1.17934351e+00 6.99941133e-02-5.06899867e-05    3
 1.96175724e-08-3.18777376e-12-1.52526970e+04 3.35279941e+01                   4
dc5h11o    4/ 7/97 thermc    5h  11o   1   0g   300.000  5000.000 1393.000   41
 1.75869049e+01 2.45367427e-02-8.37092452e-06 1.29739442e-09-7.51829993e-14    2
-1.95805248e+04-6.66778452e+01-9.19732265e-01 6.67848684e-02-4.52387295e-05    3
 1.59896239e-08-2.33753316e-12-1.30295529e+04 3.31057974e+01                   4
ac5h10ooh-a 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.08033421e+01 2.39098428e-02-8.24362632e-06 1.28671631e-09-7.49309879e-14    2
-1.43668956e+04-7.72278777e+01 1.92752694e+00 6.62119271e-02-4.42529136e-05    3
```

```
 1.52034923e-08-2.14475494e-12-7.59955032e+03 2.48376686e+01                   4
ac5h10ooh-b 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1370.000   61
 2.00512420e+01 2.47327304e-02-8.57010885e-06 1.34226786e-09-7.83560224e-14    2
-1.67014487e+04-7.27190529e+01 5.28512416e+00 4.77700392e-02-1.54984353e-05    3
-2.61348737e-09 1.73286139e-12-1.04173004e+04 1.06664123e+01                   4
ac5h10ooh-c 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1377.000   61
 2.10704746e+01 2.27374053e-02-7.64947989e-06 1.17570276e-09-6.77730952e-14    2
-1.58331898e+04-7.81659975e+01 2.21773347e+00 6.17651980e-02-3.57005622e-05    3
 8.88476932e-09-5.76303131e-13-8.88591408e+03 2.46959184e+01                   4
ac5h10ooh-d 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.08033421e+01 2.39098428e-02-8.24362632e-06 1.28671631e-09-7.49309879e-14    2
-1.43668956e+04-7.72278777e+01 1.92752694e+00 6.62119271e-02-4.42529136e-05    3
 1.52034923e-08-2.14475494e-12-7.59955032e+03 2.48376686e+01                   4
bc5h10ooh-a 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   61
 2.11625881e+01 2.33841862e-02-8.01220120e-06 1.24527043e-09-7.22990927e-14    2
-1.70384734e+04-8.15217232e+01 1.43594647e+00 7.20044368e-02-5.49898738e-05    3
 2.23328599e-08-3.74982135e-12-1.03969075e+04 2.35961050e+01                   4
bc5h10ooh-c 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1391.000   61
 2.13842663e+01 2.22633272e-02-7.43806889e-06 1.13756434e-09-6.53397689e-14    2
-1.84863598e+04-8.21990236e+01-1.79813412e+00 6.72195533e-02-4.59753869e-05    3
 1.57553670e-08-2.12893396e-12-1.16932988e+04 2.31266982e+01                   4
bc5h10ooh-d 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1397.000   61
 2.11625881e+01 2.33841862e-02-8.01220120e-06 1.24527043e-09-7.22990927e-14    2
-1.70384734e+04-8.15217232e+01 1.43594647e+00 7.20044368e-02-5.49898738e-05    3
 2.23328599e-08-3.74982135e-12-1.03969075e+04 2.35961050e+01                   4
cc5h10ooh-a 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.11659781e+01 2.35032656e-02-8.08135042e-06 1.25907503e-09-7.32274766e-14    2
-1.65768464e+04-8.12148210e+01 1.04846215e+00 7.13758721e-02-5.22072728e-05    3
 2.00208640e-08-3.17003704e-12-9.65470650e+03 2.65561943e+01                   4
cc5h10ooh-b 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1383.000   61
 2.02705195e+01 2.43248985e-02-8.37954070e-06 1.30725766e-09-7.61023543e-14    2
-1.86849641e+04-7.63969934e+01 4.23627426e+00 5.42157242e-02-2.60405689e-05    3
 3.99404659e-09-2.97828919e-13-1.23586317e+04 1.27027785e+01                   4
cc5h10ooh-d 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.11659781e+01 2.35032656e-02-8.08135042e-06 1.25907503e-09-7.32274766e-14    2
-1.65768464e+04-8.12148210e+01 1.04846215e+00 7.13758721e-02-5.22072728e-05    3
 2.00208640e-08-3.17003704e-12-9.65470650e+03 2.65561943e+01                   4
dc5h10ooh-a 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1392.000   61
 2.08033421e+01 2.39098428e-02-8.24362632e-06 1.28671631e-09-7.49309879e-14    2
-1.43668956e+04-7.83250091e+01 1.92752694e+00 6.62119271e-02-4.42529136e-05    3
 1.52034923e-08-2.14475494e-12-7.59955032e+03 2.37405373e+01                   4
dc5h10ooh-b 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1681.000   61
 1.71140905e+01 2.86220740e-02-1.03117570e-05 1.66320595e-09-9.92258823e-14    2
-1.50228746e+04-5.65523659e+01 4.37122288e+00 5.09132810e-02-2.03893592e-05    3
 1.02899394e-09 7.47497984e-13-1.01473957e+04 1.40716112e+01                   4
dc5h10ooh-c 7/27/98 thrmc    5h  11o   2   0g   300.000  5000.000 1377.000   61
 2.10704746e+01 2.27374053e-02-7.64947989e-06 1.17570276e-09-6.77730952e-14    2
-1.58331898e+04-7.88554791e+01 2.21773347e+00 6.17651980e-02-3.57005622e-05    3
 8.88476932e-09-5.76303131e-13-8.88591408e+03 2.40064367e+01                   4
ac5h10ooh-ao2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1387.000   71
 2.33999306e+01 2.65206211e-02-9.17685631e-06 1.43583511e-09-8.37547567e-14    2
-3.34504714e+04-8.62552710e+01 3.83189606e+00 6.81846388e-02-4.21858592e-05    3
 1.30324104e-08-1.61336238e-12-2.61856984e+04 2.03812976e+01                   4
ac5h10ooh-bo2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1397.000   71
 2.45014540e+01 2.51929889e-02-8.62958299e-06 1.34090455e-09-7.78362293e-14    2
-3.61198146e+04-9.28078912e+01 4.56288637e+00 7.35784062e-02-5.46335411e-05    3
 2.16919789e-08-3.58533261e-12-2.93175789e+04 1.37300764e+01                   4
ac5h10ooh-co2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1391.000   71
 2.59961550e+01 2.43616779e-02-8.44524226e-06 1.32323370e-09-7.72703834e-14    2
-3.64976021e+04-1.02337310e+02 3.56286895e+00 7.37122319e-02-4.85533119e-05    3
 1.55421856e-08-1.91447429e-12-2.84487024e+04 1.91485249e+01                   4
ac5h10ooh-do2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1387.000   71
 2.33999306e+01 2.65206211e-02-9.17685631e-06 1.43583511e-09-8.37547567e-14    2
-3.34504714e+04-8.55657893e+01 3.83189606e+00 6.81846388e-02-4.21858592e-05    3
 1.30324104e-08-1.61336238e-12-2.61856984e+04 2.10707792e+01                   4
bc5h10ooh-ao2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1397.000   71
 2.45014540e+01 2.51929889e-02-8.62958299e-06 1.34090455e-09-7.78362293e-14    2
-3.61198146e+04-9.28078912e+01 4.56288637e+00 7.35784062e-02-5.46335411e-05    3
 2.16919789e-08-3.58533261e-12-2.93175789e+04 1.37300764e+01                   4
bc5h10ooh-co2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1397.000   71
 2.65745569e+01 2.36087124e-02-8.16798053e-06 1.27543088e-09-7.43015036e-14    2
-3.92602205e+04-1.07215768e+02 3.11219650e+00 7.95499083e-02-5.90924830e-05    3
 2.24110632e-08-3.44150748e-12-3.12615333e+04 1.83432551e+01                   4
bc5h10ooh-do2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1397.000   71
 2.45014540e+01 2.51929889e-02-8.62958299e-06 1.34090455e-09-7.78362293e-14    2
-3.61198146e+04-9.34973728e+01 4.56288637e+00 7.35784062e-02-5.46335411e-05    3
 2.16919789e-08-3.58533261e-12-2.93175789e+04 1.30405948e+01                   4
cc5h10ooh-ao2 7/27/98 thrmc    5h  11o   4   0g   300.000  5000.000 1391.000   71
```

```
 2.59961560e+01 2.43616793e-02-8.44524226e-06 1.32323370e-09-7.72703834e-14    2
-3.64976021e+04-1.02337310e+02 3.56286895e+00 7.37122319e-02-4.85533119e-05    3
 1.55421856e-08-1.91447429e-12-2.84487024e+04 1.91485249e+01                   4
cc5h10ooh-bo2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1397.000    71
 2.65745569e+01 2.36817124e-02-8.16798053e-06 1.27543088e-09-7.43015036e-14    2
-3.92602205e+04-1.07215768e+02 3.11219650e+00 7.95499083e-02-5.90924830e-05    3
 2.24110632e-08-3.44150748e-12-3.12615333e+04 1.83432551e+01                   4
cc5h10ooh-do2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.59961560e+01 2.43616793e-02-8.44524226e-06 1.32323370e-09-7.72703834e-14    2
-3.64976021e+04-1.02337310e+02 3.56286895e+00 7.37122319e-02-4.85533119e-05    3
 1.55421856e-08-1.91447429e-12-2.84487024e+04 1.91485249e+01                   4
dc5h10ooh-ao2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.33999306e+01 2.65206211e-02-9.17685631e-06 1.43583511e-09-8.37547567e-14    2
-3.34504714e+04-8.55657893e+01 3.83189606e+00 6.81846388e-02-4.21858592e-05    3
 1.30324104e-08-1.61336238e-12-2.61856984e+04 2.10707792e+01                   4
dc5h10ooh-bo2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1397.000    71
 2.45014540e+01 2.51929889e-02-8.62958299e-06 1.34090455e-09-7.78362293e-14    2
-3.61198146e+04-9.34973728e+01 4.56288637e+00 7.35784062e-02-5.46335411e-05    3
 2.16919789e-08-3.58533261e-12-2.93175789e+04 1.30405948e+01                   4
dc5h10ooh-co2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.59961560e+01 2.43616793e-02-8.44524226e-06 1.32323370e-09-7.72703834e-14    2
-3.64976021e+04-1.02337310e+02 3.56286895e+00 7.37122319e-02-4.85533119e-05    3
 1.55421856e-08-1.91447429e-12-2.84487024e+04 1.91485249e+01                   4
a-ac5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1371.00     61
 1.80576624e+01 2.21664890e-02-7.87642300e-06 1.25444585e-09-7.40861328e-14    2
-2.50353632e+04-7.53718782e+01-3.12406832e+00 6.53619579e-02-3.97637688e-05    3
 1.12697830e-08-1.18120030e-12-1.69737388e+04 4.07521583e+01                   4
a-bc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1382.00     61
 1.86652877e+01 2.13598734e-02-7.52975880e-06 1.19287800e-09-7.01891378e-14    2
-2.77496616e+04-7.75749394e+01-2.76334033e+00 7.23487211e-02-5.55616263e-05    3
 2.25658441e-08-3.82992076e-12-2.02677933e+04 3.74075826e+01                   4
a-cc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1373.00     61
 1.87148832e+01 2.16122625e-02-7.68638433e-06 1.22492227e-09-7.23734176e-14    2
-2.74336223e+04-7.86661849e+01-3.51633623e+00 6.86975884e-02-4.46579237e-05    3
 1.40670556e-08-1.74934766e-12-1.91663581e+04 4.25589840e+01                   4
a-dc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1368.00     61
 1.73081373e+01 2.28491250e-02-8.12276465e-06 1.29408434e-09-7.64438847e-14    2
-3.52062516e+04-7.10628522e+01-4.14429760e+00 6.51989562e-02-3.73536626e-05    3
 9.22783007e-09-6.73298964e-13-2.69163477e+04 4.70167331e+01                   4
b-cc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1385.00     61
 1.92598600e+01 2.08099611e-02-7.32974772e-06 1.16055317e-09-6.82613470e-14    2
-3.00830774e+04-8.18004129e+01-3.37535249e+00 7.70352310e-02-6.28442248e-05    3
 2.69389203e-08-4.75190161e-12-2.24367836e+04 3.87826632e+01                   4
b-dc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1373.00     61
 1.87653667e+01 2.15362849e-02-7.65224713e-06 1.21871934e-09-7.19753198e-14    2
-2.85747158e+04-8.06460279e+01-2.73108687e+00 6.70391324e-02-4.35138990e-05    3
 1.38175873e-08-1.75593164e-12-2.05593275e+04 3.66133237e+01                   4
c-dc5h10o  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1383.00     61
 1.85201884e+01 2.14489156e-02-7.55266486e-06 1.19562146e-09-7.03146400e-14    2
-2.65081886e+04-7.62917959e+01-3.17722836e+00 7.29625837e-02-5.57042158e-05    3
 2.23478002e-08-3.73315078e-12-1.89470828e+04 4.01292996e+01                   4
c5h11o2-1  7/27/98 thermc   5h  11o  2    0g   300.000  5000.000 1389.000    51
 1.87676591e+01 2.58901339e-02-8.88632457e-06 1.38266557e-09-8.03357567e-14    2
-2.01827790e+04-6.73782271e+01 2.83589108e+00 5.89999859e-02-3.43627295e-05    3
 1.00308007e-08-1.17672644e-12-1.41498401e+04 1.97910499e+01                   4
c5h11o2-2  7/27/98 thermc   5h  11o  2    0g   300.000  5000.000 1393.000    51
 1.91109668e+01 2.54972629e-02-8.72816395e-06 1.35560179e-09-7.86632141e-14    2
-2.23858792e+04-7.05707166e+01 1.96899027e+00 6.40644830e-02-4.21700472e-05    3
 1.47610460e-08-2.18348296e-12-1.62053385e+04 2.21485671e+01                   4
c5h11o2-3  7/27/98 thermc   5h  11o  2    0g   300.000  5000.000 1393.000    51
 1.91109668e+01 2.54972629e-02-8.72816395e-06 1.35560179e-09-7.86632141e-14    2
-2.23858792e+04-7.05707166e+01 1.96899027e+00 6.40644830e-02-4.21700472e-05    3
 1.47610460e-08-2.18348296e-12-1.62053385e+04 2.21485671e+01                   4
c5h11o2h-1 7/27/98 thermc   5h  12o  2    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.13062775e+01 2.60260533e-02-8.97309467e-06 1.40056857e-09-8.15610523e-14    2
-3.83498621e+04-8.21718512e+01 1.89944380e+00 6.75655998e-02-4.18569148e-05    3
 1.28073578e-08-1.53681164e-12-3.12010284e+04 2.34506813e+01                   4
c5h11o2h-2 7/27/98 thermc   5h  12o  2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.14020753e+01 2.58516287e-02-8.89138008e-06 1.38549320e-09-8.05869739e-14    2
-4.04404856e+04-8.39092253e+01 8.87509647e-01 7.34550713e-02-5.15521767e-05    3
 1.90236400e-08-2.92044618e-12-3.32360315e+04 2.64601028e+01                   4
c5h11o2h-3 7/27/98 thermc   5h  12o  2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.14020753e+01 2.58516287e-02-8.89138008e-06 1.38549320e-09-8.05869739e-14    2
-4.04404856e+04-8.39092253e+01 8.87509647e-01 7.34550713e-02-5.15521767e-05    3
 1.90236400e-08-2.92044618e-12-3.32360315e+04 2.64601028e+01                   4
c5h11o-1   1/16/95 thermc   5h  11o  1    0g   300.000  5000.000 1391.00     41
 1.70047747e+01 2.50983038e-02-8.57883502e-06 1.33127565e-09-7.72119840e-14    2
-1.83166706e+04-6.22689673e+01-9.85835506e-01 6.52075686e-02-4.25705013e-05    3
```

```
 1.44327831e-08-2.02530265e-12-1.18330549e+04 3.51054202e+01                   4
c5h11o-2    1/16/95 therc   5h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1395.00     41
 1.74554592e+01 2.48491858e-02-8.52055772e-06 1.32490832e-09-7.69469515e-14    2
-2.06173439e+04-6.50485639e+01-1.32704535e+00 6.88299185e-02-4.85340693e-05    3
 1.82085756e-08-2.85945035e-12-1.40460009e+04 3.58857833e+01                   4
c5h11o-3    1/16/95 thermc  5h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1395.00     41
 1.74554592e+01 2.48491858e-02-8.52055772e-06 1.32490832e-09-7.69469515e-14    2
-2.06173439e+04-6.57380456e+01-1.32704535e+00 6.88299185e-02-4.85340693e-05    3
 1.82085756e-08-2.85945035e-12-1.40460009e+04 3.51963017e+01                   4
c5h10ooh1-2 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    61
 2.07257992e+01 2.31605370e-02-7.81968792e-06 1.20445065e-09-6.95247479e-14    2
-1.45564825e+04-7.54991322e+01 2.97359005e+00 5.87279003e-02-3.19022072e-05    3
 6.93341806e-09-2.13742056e-13-7.87881978e+03 2.18069394e+01                   4
c5h10ooh1-3 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    61
 2.07257992e+01 2.31605370e-02-7.81968792e-06 1.20445065e-09-6.95247479e-14    2
-1.45564825e+04-7.54991322e+01 2.97359005e+00 5.87279003e-02-3.19022072e-05    3
 6.93341806e-09-2.13742056e-13-7.87881978e+03 2.18069394e+01                   4
c5h10ooh1-4 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    61
 2.07257992e+01 2.31605370e-02-7.81968792e-06 1.20445065e-09-6.95247479e-14    2
-1.45564825e+04-7.54991322e+01 2.97359005e+00 5.87279003e-02-3.19022072e-05    3
 6.93341806e-09-2.13742056e-13-7.87881978e+03 2.18069394e+01                   4
c5h10ooh1-5 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.09083640e+01 2.38556147e-02-8.23308824e-06 1.28595629e-09-7.49236173e-14    2
-1.32885314e+04-7.71812742e+01 2.63768998e+00 6.31829064e-02-3.96146538e-05    3
 1.22967569e-08-1.50340237e-12-6.58486453e+03 2.21720911e+01                   4
c5h10ooh2-1 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.12476011e+01 2.34704161e-02-8.07850048e-06 1.25954619e-09-7.32930040e-14    2
-1.54921321e+04-8.03500133e+01 1.77033407e+00 6.82289092e-02-4.73868359e-05    3
 1.70067041e-08-2.50637499e-12-8.63967732e+03 2.45413582e+01                   4
c5h10ooh2-3 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.11169318e+01 2.26986457e-02-7.63263375e-06 1.17243697e-09-6.75488910e-14    2
-1.67780275e+04-7.89606860e+01 2.09502214e+00 6.38468779e-02-3.97543431e-05    3
 1.16640179e-08-1.21585829e-12-9.93286805e+03 2.42166673e+01                   4
c5h10ooh2-4 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.11169318e+01 2.26986457e-02-7.63263375e-06 1.17243697e-09-6.75488910e-14    2
-1.67780275e+04-7.89606860e+01 2.09502214e+00 6.38468779e-02-3.97543431e-05    3
 1.16640179e-08-1.21585829e-12-9.93286805e+03 2.42166673e+01                   4
c5h10ooh2-5 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.12476011e+01 2.34704161e-02-8.07850048e-06 1.25954619e-09-7.32930040e-14    2
-1.54921321e+04-8.03500133e+01 1.77033407e+00 6.82289092e-02-4.73868359e-05    3
 1.70067041e-08-2.50637499e-12-8.63967732e+03 2.45413582e+01                   4
c5h10ooh3-1 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.12476011e+01 2.34704161e-02-8.07850048e-06 1.25954619e-09-7.32930040e-14    2
-1.54921321e+04-8.03500133e+01 1.77033407e+00 6.82289092e-02-4.73868359e-05    3
 1.70067041e-08-2.50637499e-12-8.63967732e+03 2.45413582e+01                   4
c5h10ooh3-2 7/27/98 thrmc   5h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.11169318e+01 2.26986457e-02-7.63263375e-06 1.17243697e-09-6.75488910e-14    2
-1.67780275e+04-7.89606860e+01 2.09502214e+00 6.38468779e-02-3.97543431e-05    3
 1.16640179e-08-1.21585829e-12-9.93286805e+03 2.42166673e+01                   4
c5h10ooh1-2o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh1-3o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh1-4o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh1-5o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.39683498e+01 2.58850711e-02-8.92232805e-06 1.39230986e-09-8.10630937e-14    2
-3.22382840e+04-8.74989136e+01 5.71344056e+00 6.51365802e-02-4.05159455e-05    3
 1.27562645e-08-1.62998731e-12-2.54980766e+04 1.18468117e+01                   4
c5h10ooh2-1o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh2-3o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1398.000    71
 2.46751165e+01 2.50822789e-02-8.60014790e-06 1.33727095e-09-7.76651025e-14    2
-3.66525560e+04-9.39954350e+01 3.94516643e+00 7.54394831e-02-5.63713273e-05    3
 2.23544878e-08-3.67201617e-12-2.96046569e+04 1.67209782e+01                   4
c5h10ooh2-4o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1398.000    71
 2.46751165e+01 2.50822789e-02-8.60014790e-06 1.33727095e-09-7.76651025e-14    2
-3.66525560e+04-9.39954350e+01 3.94516643e+00 7.54394831e-02-5.63713273e-05    3
 2.23544878e-08-3.67201617e-12-2.96046569e+04 1.67209782e+01                   4
c5h10ooh2-5o2 7/27/98 tmc   5h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
```

```
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh3-1o2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.43180074e+01 2.54898447e-02-8.76399118e-06 1.36528214e-09-7.93951423e-14    2
-3.44451826e+04-9.07264524e+01 4.81081082e+00 7.03545265e-02-4.85357662e-05    3
 1.76117524e-08-2.66349074e-12-2.75481002e+04 1.43755711e+01                   4
c5h10ooh3-2o2 7/27/98 tmc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1398.000    71
 2.46751165e+01 2.50822789e-02-8.60014790e-06 1.33727095e-09-7.76651025e-14    2
-3.66525560e+04-9.39954350e+01 3.94516643e+00 7.54394831e-02-5.63713273e-05    3
 2.23544878e-08-3.67201617e-12-2.96046569e+04 1.67209782e+01                   4
c5h10o1-2  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1382.00     61
 1.83450823e+01 2.15894287e-02-7.59914917e-06 1.20265688e-09-7.07149348e-14    2
-2.52918816e+04-7.38748127e+01-2.50915891e+00 7.02820905e-02-5.23078154e-05    3
 2.05330738e-08-3.37999472e-12-1.79263879e+04 3.83402738e+01                   4
c5h10o1-3  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1370.00     61
 1.85051134e+01 2.17909650e-02-7.74803799e-06 1.23453810e-09-7.29327086e-14    2
-2.62151881e+04-7.74524221e+01-2.70067147e+00 6.51234466e-02-3.97863209e-05    3
 1.12983558e-08-1.18141056e-12-1.81611984e+04 3.87589334e+01                   4
c5h10o1-4  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1371.00     61
 1.77074517e+01 2.24725523e-02-7.98404192e-06 1.27146816e-09-7.50866945e-14    2
-3.63066445e+04-7.27392560e+01-3.94205066e+00 6.68440102e-02-4.09940878e-05    3
 1.17684771e-08-1.26029870e-12-2.80943137e+04 4.58617150e+01                   4
c5h10o1-5  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1457.00     61
 2.13684109e+01 1.97321411e-02-7.12842160e-06 1.14789888e-09-6.83162787e-14    2
-3.89834904e+04-1.00032176e+02-3.02904503e+00 6.01320166e-02-2.12072490e-05    3
-4.91313274e-09 3.07577547e-12-2.91028862e+04 3.64698785e+01                   4
c5h10o2-3  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1385.00     61
 1.89379846e+01 2.10434849e-02-7.40107577e-06 1.17069402e-09-6.88106356e-14    2
-2.76228814e+04-7.74017673e+01-3.03891874e+00 7.46406721e-02-5.91275018e-05    3
 2.46307903e-08-4.24312686e-12-2.01088998e+04 4.00106761e+01                   4
c5h10o2-4  1/22/95 thermc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1376.00     61
 1.91186278e+01 2.12169126e-02-7.53764833e-06 1.20035780e-09-7.08866585e-14    2
-2.85216189e+04-8.03408390e+01-3.50702064e+00 7.13707278e-02-4.99483546e-05    3
 1.76515898e-08-2.56653255e-12-2.03198734e+04 4.22612571e+01                   4
neoc5h11o2 7/13/98 thermc   5h  11o  2    0g   300.000  5000.000 1396.000    51
 2.02157247e+01 2.45786365e-02-8.41704919e-06 1.30775217e-09-7.59095109e-14    2
-2.31877371e+04-8.01387611e+01 7.30403748e-01 7.05036948e-02-5.02866599e-05    3
 1.89083885e-08-2.94948183e-12-1.64308023e+04 2.44155402e+01                   4
neoc5h11o2h 7/13/98 thrmc   5h  12o  2    0g   300.000  5000.000 1399.000    61
 2.26835440e+01 2.46838700e-02-8.47310667e-06 1.31876182e-09-7.66483771e-14    2
-4.12877712e+04-9.44344738e+01-1.38233642e-01 7.89911468e-02-5.79776533e-05    3
 2.18789315e-08-3.35549515e-12-3.34973569e+04 2.77192466e+01                   4
neoc5h11o  7/13/98 thermc   5h  11o  1    0g   300.000  5000.000 1399.000    41
 1.91195281e+01 2.30837786e-02-7.83941709e-06 1.21152000e-09-7.00727365e-14    2
-2.15314869e+04-7.85283647e+01-2.41265702e+00 7.56872456e-02-5.73116804e-05    3
 2.24731318e-08-3.58123651e-12-1.43300707e+04 3.62184819e+01                   4
neoc5h10ooh 7/13/98 thrmc   5h  11o  2    0g   300.000  5000.000 1398.000    61
 2.22450472e+01 2.26188828e-02-7.78497419e-06 1.21384469e-09-7.06396166e-14    2
-1.62363251e+04-8.81677091e+01 5.91196875e-01 7.45002878e-02-5.55445714e-05    3
 2.13010197e-08-3.32171399e-12-8.87531001e+03 2.76174107e+01                   4
neoc5h10ooh-o2 7/13/98 tc   5h  11o  4    0g   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.48490391e+01 2.52599638e-02-8.73651764e-06 1.36662251e-09-7.97082603e-14    2
-3.52749447e+04-9.65596713e+01 2.65748524e+00 7.58789336e-02-5.26594216e-05    3
 1.86692316e-08-2.69820831e-12-2.74393637e+04 2.30675852e+01                   4
neo-c5h10o  7/25/95 therc   5h  10o  1    0g   300.000  5000.000 1406.00     21
 1.82053617e+01 2.22888126e-02-7.59419141e-06 1.17633164e-09-6.81511068e-14    2
-2.60974377e+04-7.85618543e+01-7.04702259e+00 8.64172552e-02-7.02610933e-05    3
 2.90540959e-08-4.80586102e-12-1.79483330e+04 5.50571499e+01                   4
c3h5-a     5/27/97 thermc   3h   5   0    0g   300.000  5000.000 1397.000    01
 8.45883958e+00 1.12695483e-02-3.83792864e-06 5.94059119e-10-3.43918030e-14    2
 1.63576092e+04-2.25809450e+01-5.29131958e-01 3.34559100e-02-2.53401027e-05    3
 1.02865754e-08-1.73258340e-12 1.93834226e+04 2.53067131e+01                   4
c3h5-s     5/27/97 thermc   3h   5   0    0g   300.000  5000.000 1390.000    11
 7.88765879e+00 1.13012591e-02-3.84213130e-06 5.93982677e-10-3.43567175e-14    2
 2.82377716e+04-1.74291589e+01 1.32807335e+00 2.53107914e-02-1.51530439e-05    3
 4.74345565e-09-6.24666084e-13 3.06873903e+04 1.83328787e+01                   4
c3h5-t     5/27/97 thermc   3h   5   0    0g   300.000  5000.000 1382.000    11
 7.37492443e+00 1.17510061e-02-4.00021283e-06 6.18947395e-10-3.58215018e-14    2
 2.72874911e+04-1.43478655e+01 2.17916644e+00 2.03826623e-02-7.91413834e-06    3
 4.76906187e-10 2.70398536e-13 2.94895338e+04 1.48785684e+01                   4
c3h3              82489c    3h   3          g  0300.00   4000.00  1000.00      1
 0.08831047e+02 0.04357195e-01-0.04109067e-05-0.02368723e-08 0.04376520e-12    2
 0.03847420e+06-0.02177919e+03 0.04754200e+02 0.01108028e+00 0.02793323e-05    3
-0.05479212e-07 0.01949629e-10 0.03988883e+06 0.05854549e+01                   4
c3h2              102193h   2c   3          g  0150.00   4000.00  1000.00      1
 0.07670981e+02 0.02748749e-01-0.04370943e-05-0.06455599e-09 0.01663887e-12    2
 0.06259722e+06-0.01236890e+03 0.03166714e+02 0.02482572e+00-0.04591637e-03    3
```

```
 0.04268019e-06-0.01482152e-09 0.06350421e+06 0.08869446e+02                   4
c3h6o1-2   1/22/95 thermc   3h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1379.00     41
 1.19825289e+01 1.23964696e-02-4.39113813e-06 6.97911182e-10-4.11585127e-14    2
-1.69739189e+04-4.22894035e+01-1.21988153e+00 4.28578772e-02-3.17530249e-05    3
 1.21763736e-08-1.94154303e-12-1.22953761e+04 2.88467826e+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
ch2(s)            31287c    1h   2          g  0300.00   4000.00  1000.00      1
 0.03552889e+02 0.02066788e-01-0.01914116e-05-0.01104673e-08 0.02021350e-12    2
 0.04984975e+06 0.01686570e+02 0.03971265e+02-0.01699089e-02 0.01025369e-04    3
 0.02492551e-07-0.01981266e-10 0.04989368e+06 0.05753207e+00                   4
c3ket12    7/27/98 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    7/27/98 thermc   3h   6o   3    0g   300.000  5000.000 1381.000    41
 1.55489393e+01 1.40024914e-02-4.84114037e-06 7.57163595e-10-4.41589462e-14    2
-3.95456005e+04-4.93558904e+01 4.70097804e+00 3.71281586e-02-2.31990728e-05    3
 7.23333924e-09-9.05813028e-13-3.55230362e+04 9.74808709e+00                   4
c3ket21    7/27/98 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
nc4ket12   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.02458485e+01 1.76440360e-02-6.19054598e-06 9.77688024e-10-5.74053258e-14    2
-4.58141511e+04-7.52145443e+01 8.05387149e-01 6.52375119e-02-5.18373651e-05    3
 2.13454896e-08-3.59860255e-12-3.92395961e+04 2.84908472e+01                   4
nc4ket13   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    51
 1.90814911e+01 1.80751568e-02-6.21426271e-06 9.68245503e-10-5.63196737e-14    2
-4.58537579e+04-6.82492782e+01 3.61128634e+00 5.43913301e-02-3.92348917e-05    3
 1.48519881e-08-2.33227509e-12-4.04682412e+04 1.48248314e+01                   4
nc4ket14   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1384.000    51
 1.87230901e+01 1.84856290e-02-6.37941344e-06 9.96485363e-10-5.80638069e-14    2
-4.36454128e+04-6.49770313e+01 4.49118703e+00 4.92543745e-02-3.13296699e-05    3
 1.00698008e-08-1.31566263e-12-3.84141651e+04 1.24059050e+01                   4
nc4ket21   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1376.000    51
 1.86231473e+01 1.90969401e-02-6.70745998e-06 1.05994690e-09-6.22564248e-14    2
-4.71929933e+04-6.55477892e+01 4.69785973e+00 4.83859623e-02-3.05576939e-05    3
 1.02705744e-08-1.51713483e-12-4.18665528e+04 1.06715264e+01                   4
nc4ket23   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    51
 1.99512969e+01 1.79558596e-02-6.31230878e-06 9.98217386e-10-5.86636973e-14    2
-4.95585495e+04-7.43071328e+01 4.50575961e-01 6.48862527e-02-5.04446464e-05    3
 2.03085220e-08-3.35952497e-12-4.28779359e+04 3.00153676e+01                   4
nc4ket24   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 1.83564238e+01 1.89832980e-02-6.59179266e-06 1.03383664e-09-6.04073777e-14    2
-4.73824202e+04-6.37084003e+01 4.13063802e+00 4.89543295e-02-3.00879559e-05    3
 9.22582241e-09-1.14085821e-12-4.20520874e+04 1.39580139e+01                   4
ic4ketii   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    51
 1.96044370e+01 1.79472084e-02-6.24159496e-06 9.80077650e-10-5.73186753e-14    2
-4.51091167e+04-7.11541117e+01 2.25615224e+00 5.61317954e-02-3.72250277e-05    3
 1.19077201e-08-1.45373184e-12-3.88957414e+04 2.27721298e+01                   4
ic4ketit   7/27/98 thermc   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.09369850e+01 1.71090955e-02-6.01892169e-06 9.52353863e-10-5.59926176e-14    2
-4.77819819e+04-8.27717611e+01 1.14243741e+00 6.33840797e-02-4.73084738e-05    3
 1.77145373e-08-2.67265475e-12-4.09366796e+04 2.34844867e+01                   4
neoc5ket   7/13/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1397.000    61
 2.37026941e+01 2.15843890e-02-7.47470111e-06 1.17038715e-09-6.83143724e-14    2
-5.04983408e+04-9.46795307e+01 1.01097520e+00 7.53376897e-02-5.59848192e-05    3
 2.10040666e-08-3.16727025e-12-4.27524583e+04 2.68247723e+01                   4
nc5ket12   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.34427049e+01 2.21540692e-02-7.74817880e-06 1.22107095e-09-7.15883644e-14    2
-4.99350593e+04-9.09970812e+01 5.64845658e-01 7.74889690e-02-6.00818427e-05    3
 2.42432817e-08-4.02329880e-12-4.21262314e+04 3.12910774e+01                   4
nc5ket13   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.22507141e+01 2.25682036e-02-7.75716278e-06 1.20841089e-09-7.02784265e-14    2
-4.99523318e+04-8.38441003e+01 3.41276138e+00 6.64703687e-02-4.73015922e-05    3
 1.76547632e-08-2.73588837e-12-4.33611331e+04 1.74299711e+01                   4
nc5ket14   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
```

```
 2.22507141e+01 2.25682036e-02-7.75716278e-06 1.20841089e-09-7.02784265e-14    2
-4.99523318e+04-8.38441003e+01 3.41276138e+00 6.64703687e-02-4.73015922e-05    3
 1.76547632e-08-2.73588837e-12-4.33611331e+04 1.74299711e+01                   4
nc5ket15   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.18923836e+01 2.29785889e-02-7.92228974e-06 1.23664860e-09-7.20225245e-14    2
-4.77440532e+04-8.05723141e+01 4.29235352e+00 6.13348766e-02-3.93989990e-05    3
 1.28744810e-08-1.71975063e-12-4.13070104e+04 1.50124672e+01                   4
nc5ket21   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.17534680e+01 2.36666119e-02-8.28610759e-06 1.30663620e-09-7.66324076e-14    2
-5.12815467e+04-8.09340957e+01 4.56687437e+00 6.01978739e-02-3.82935508e-05    3
 1.29220662e-08-1.89791227e-12-4.47703435e+04 1.29580830e+01                   4
nc5ket23   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.31409808e+01 2.24801534e-02-7.87662916e-06 1.24282516e-09-7.29252729e-14    2
-5.36784029e+04-9.00538236e+01 1.09304151e-01 7.75997760e-02-5.94124810e-05    3
 2.36744270e-08-3.89094338e-12-4.57495597e+04 3.32799795e+01                   4
nc5ket24   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    61
 2.18705213e+01 2.30906605e-02-7.98079577e-06 1.24778184e-09-7.27496692e-14    2
-5.36851235e+04-8.25067692e+01 3.06610104e+00 6.61154090e-02-4.59935288e-05    3
 1.67826985e-08-2.55739806e-12-4.70012879e+04 1.89115800e+01                   4
nc5ket25   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.15222391e+01 2.34838787e-02-8.13830214e-06 1.27466935e-09-7.44091473e-14    2
-5.14803657e+04-7.92854346e+01 3.94521860e+00 6.09776240e-02-3.80769631e-05    3
 1.19856646e-08-1.53608989e-12-4.49470146e+04 1.65020131e+01                   4
nc5ket31   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.13745243e+01 2.36083197e-02-8.17992391e-06 1.28094334e-09-7.47626714e-14    2
-5.15035297e+04-7.80907656e+01 4.32175190e+00 6.15922098e-02-4.11876417e-05    3
 1.47888270e-08-2.28282203e-12-4.52605745e+04 1.43789984e+01                   4
nc5ket32   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.29536744e+01 2.26192649e-02-7.91922638e-06 1.24883440e-09-7.32467701e-14    2
-5.36792159e+04-8.86117968e+01 7.24497110e-01 7.71622935e-02-6.10369902e-05    3
 2.55909432e-08-4.44696298e-12-4.60989830e+04 3.00522534e+01                   4
ic5ketaa   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1391.000    61
 2.28221298e+01 2.24154712e-02-7.77969462e-06 1.21989392e-09-7.12735977e-14    2
-4.92345311e+04-8.70457338e+01 2.06104527e+00 6.81618265e-02-4.50915966e-05    3
 1.45366684e-08-1.81252797e-12-4.17889200e+04 2.53649587e+01                   4
ic5ketab   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.40842006e+01 2.16434154e-02-7.58091068e-06 1.19599268e-09-7.01732329e-14    2
-5.18763832e+04-9.75616536e+01 9.90030235e-01 7.52486642e-02-5.50772372e-05    3
 2.03582394e-08-3.04665058e-12-4.38361216e+04 2.65683915e+01                   4
ic5ketac   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1395.000    61
 2.30363274e+01 2.21332593e-02-7.65961812e-06 1.19874099e-09-6.99430757e-14    2
-5.13826384e+04-8.94859951e+01 1.17980959e+00 7.32893841e-02-5.32558997e-05    3
 1.96219726e-08-2.91876925e-12-4.38404480e+04 2.77982752e+01                   4
ic5ketad   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1391.000    61
 2.28221298e+01 2.24154712e-02-7.77969462e-06 1.21989392e-09-7.12735977e-14    2
-4.92345311e+04-8.70457338e+01 2.06104527e+00 6.81618265e-02-4.50915966e-05    3
 1.45366684e-08-1.81252797e-12-4.17889200e+04 2.53649587e+01                   4
ic5ketca   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    61
 2.24366598e+01 2.28357538e-02-7.94528103e-06 1.24789171e-09-7.29909842e-14    2
-5.29439523e+04-8.56217283e+01 1.58349151e+00 6.84031276e-02-4.47869932e-05    3
 1.42858397e-08-1.76538073e-12-4.54088511e+04 2.74539420e+01                   4
ic5ketcb   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.38381050e+01 2.19492828e-02-7.70845830e-06 1.21824528e-09-7.15652458e-14    2
-5.56527505e+04-9.76513664e+01 2.97401995e-01 7.64035840e-02-5.58642785e-05    3
 2.06570759e-08-3.10185324e-12-4.74239290e+04 2.89698043e+01                   4
ic5ketcd   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1383.000    61
 2.22445195e+01 2.32429375e-02-8.13939936e-06 1.28375132e-09-7.53028874e-14    2
-5.25016214e+04-8.53496595e+01 2.27135608e+00 6.77725287e-02-4.64127889e-05    3
 1.65517953e-08-2.47901257e-12-4.52485605e+04 2.28504134e+01                   4
ic5ketda   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.21407776e+01 2.27007313e-02-7.81265891e-06 1.21818045e-09-7.08948396e-14    2
-4.89796375e+04-8.26879634e+01 3.49825603e+00 6.45731036e-02-4.35635876e-05    3
 1.50971326e-08-2.14893511e-12-4.23089029e+04 1.80784657e+01                   4
ic5ketdb   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1393.000    61
 2.24631997e+01 2.22167618e-02-7.59782055e-06 1.17954544e-09-6.84353254e-14    2
-5.16376345e+04-8.67771138e+01 3.09689898e+00 6.99456313e-02-5.37151027e-05    3
 2.18922835e-08-3.68543985e-12-4.51190375e+04 1.64198265e+01                   4
ic5ketdc   7/27/98 thermc   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.35511020e+01 2.20370496e-02-7.70229869e-06 1.21333612e-09-7.11148382e-14    2
-5.11090402e+04-9.29911716e+01 4.19611403e-02 7.96221577e-02-6.28755971e-05    3
 2.57640021e-08-4.32179573e-12-4.31706563e+04 3.23917806e+01                   4
ic4h7-i1   4/ 2/97 thermc   4h   7    0    0g   300.000  5000.000 1389.000    21
 1.10957600e+01 1.57810049e-02-5.38419615e-06 8.34360121e-10-4.83401481e-14    2
 2.24175827e+04-3.40426822e+01 1.87632434e+00 3.54486107e-02-2.13104949e-05    3
 6.73400492e-09-9.03166339e-13 2.58712914e+04 1.62429161e+01                   4
c3h6oh     1/ 7/98 thermc   3h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1674.000    31
 9.31287816e+00 1.67579212e-02-5.75555480e-06 9.00584362e-10-5.26566836e-14    2
-1.20169635e+04-1.95011064e+01 1.20494302e+00 3.30857885e-02-1.63893637e-05    3
```

```
 3.18103918e-09-6.84229288e-14-9.12961720e+03 2.47155202e+01                   4
hoc3h6o2   1/ 7/98 thermc   3h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1397.000    41
 1.42691004e+01 1.71837825e-02-5.83419536e-06 9.00994191e-10-5.20716210e-14    2
-3.14501750e+04-4.15295035e+01 3.06954289e+00 4.43105640e-02-3.18636260e-05    3
 1.26409287e-08-2.12751901e-12-2.75893676e+04 1.83891218e+01                   4
o2c2h4o2h  6/28/95 thermc   2h   5o   4    0g   300.000  5000.000 1387.00     41
 1.45471032e+01 1.23393823e-02-4.27259469e-06 6.68763337e-10-3.90196721e-14    2
-1.96338761e+04-4.08784236e+01 5.90031872e+00 3.05658528e-02-1.85905950e-05    3
 5.67871605e-09-7.02799577e-13-1.63916571e+04 6.33051038e+00                   4
ch2o2hcho  6/28/95 thermc   2h   4o   3    0g   300.000  5000.000 1380.00     31
 1.24064339e+01 9.47233784e-03-3.28107928e-06 5.13772211e-10-2.99872803e-14    2
-3.49123142e+04-3.39479874e+01 5.52382546e+00 2.42068306e-02-1.52898974e-05    3
 5.01728362e-09-6.96406358e-13-3.23406789e+04 3.57240645e+00                   4
ic4h7ooh   7/19/95 thermc   4h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1392.00     41
 1.69234564e+01 1.78396769e-02-6.14273279e-06 9.57895028e-10-5.57438304e-14    2
-2.00040686e+04-5.94746070e+01 2.99117402e+00 5.03349278e-02-3.56280061e-05    3
 1.33952154e-08-2.11053409e-12-1.51095046e+04 1.54537413e+01                   4
ic3h5cho   7/19/95 thermc   4h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1396.00     21
 1.36203958e+01 1.37917192e-02-4.73370118e-06 7.36655226e-10-4.20097974e-14    2
-2.00025274e+04-4.73184531e+01 6.27183793e-01 4.66780254e-02-3.74430631e-05    3
 1.58330542e-08-2.73952155e-12-1.57203117e+04 2.16034294e+01                   4
tc3h6ocho  8/25/95 thermc   4h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1394.00     31
 1.70371287e+01 1.54400645e-02-5.28332886e-06 8.21085347e-10-4.76898429e-14    2
-2.75871941e+04-6.37271230e+01 3.70830259e-01 5.38475661e-02-3.82477565e-05    3
 1.32882237e-08-1.79228730e-12-2.18391262e+04 2.58142112e+01                   4
tc3h6cho   7/19/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1389.00     21
 1.31013047e+01 1.66391865e-02-5.68457623e-06 8.18083510e-10-5.11290161e-14    2
-1.30638647e+04-4.42705813e+01 1.87052762e+00 4.14869677e-02-2.66815701e-05    3
 9.01531610e-09-1.27870633e-12-8.97730744e+03 1.66174178e+01                   4
ic3h7cho   6/26/95 thermc   4h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1391.00     31
 1.37501656e+01 1.83126722e-02-6.28572629e-06 9.78250756e-10-5.68538653e-14    2
-3.26936771e+04-4.77270548e+01-2.73021382e-01 4.89696307e-02-3.12770049e-05    3
 1.00052945e-08-1.27512074e-12-2.76054737e+04 2.83451139e+01                   4
ic4h7oh    4/13/95 thermc   4h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1384.00     31
 1.35043419e+01 1.78646968e-02-5.99304371e-06 9.18717641e-10-5.28435302e-14    2
-2.58255688e+04-4.44645715e+01 1.690999899+00 4.27168891e-02-2.49281695e-05    3
 7.00961522e-09-7.23262828e-13-2.14512334e+04 1.99500833e+01                   4
ic3h6co   03/03/95 thermc   4h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1397.00     41
 1.32548232e+01 1.40142787e-02-4.78910215e-06 7.42924342e-10-4.30737566e-14    2
-2.00529779e+04-4.44810221e+01 2.28039055e+00 4.17016989e-02-3.25089661e-05    3
 1.37243419e-08-2.40573132e-12-1.63939712e+04 1.38187714e+01                   4
ic4h6oh    8/19/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1390.00     31
 1.40310926e+01 1.55317541e-02-5.32754961e-06 8.28785902e-10-4.81545257e-14    2
-7.69378228e+03-4.76555306e+01 8.63371227e-01 4.68711282e-02-3.43580339e-05    3
 1.33031052e-08-2.13914975e-12-3.14948305e+03 2.29075523e+01                   4
ic3h5co    8/17/95 thermc   4h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1396.00     21
 1.31995995e+01 1.16676960e-02-4.01560139e-06 6.26070784e-10-3.64313327e-14    2
-1.03919862e+03-4.33880233e+01 1.40475057e+00 4.18692403e-02-3.43900951e-05    3
 1.47749333e-08-2.58121915e-12 2.80734533e+03 1.90439114e+01                   4
ic3h7co    1/23/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1396.00     21
 1.28987340e+01 1.66809722e-02-5.67154574e-06 8.77024651e-10-5.07426140e-14    2
-1.35090137e+04-4.12607668e+01 4.33384289e-01 4.46235649e-02-2.91982909e-05    3
 9.72341221e-09-1.30412544e-12-9.07000444e+03 2.60898982e+01                   4
tc3h6o2cho 8/ 2/95 thermc   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1386.00     41
 1.85534443e+01 1.68774389e-02-5.90752965e-06 9.31518085e-10-5.46345187e-14    2
-2.85447191e+04-6.82486667e+01 2.17883383e+00 5.41595832e-02-3.83435886e-05    3
 1.38308104e-08-2.04190147e-12-2.27394154e+04 2.00751264e+01                   4
tc3h6o2hco 8/ 2/95 thermc   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1387.00     51
 2.06472678e+01 1.48526500e-02-5.25104875e-06 8.33619219e-10-4.91256069e-14    2
-2.88719869e+04-7.95951389e+01 2.03864428e+00 5.80421003e-02-4.32123528e-05    3
 1.58792094e-08-2.32209543e-12-2.24284673e+04 2.03680990e+01                   4
ipro2hcho   8/2/95 thermc   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1387.00     51
 2.06288832e+01 1.48625539e-02-5.25305276e-06 8.33772951e-10-4.91277401e-14    2
-2.27589076e+04-7.82962888e+01 2.05984770e+00 5.82331716e-02-4.37672100e-05    3
 1.63249918e-08-2.43462051e-12-1.63496250e+04 2.13687921e+01                   4
tc3h6ohcho 8/ 1/95 thermc   4h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1396.00     41
 1.70788996e+01 1.74005554e-02-5.93008112e-06 9.18860909e-10-5.32512140e-14    2
-5.38730427e+04-6.38638754e+01 2.10033500e-01 5.63086284e-02-3.95158669e-05    3
 1.37780428e-08-1.89068805e-12-4.80402638e+04 2.67836070e+01                   4
tc3h6oh    8/ 1/95 thermc   3h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1389.00     31
 1.01256920e+01 1.61868427e-02-5.52405957e-06 8.56051932e-10-4.95935542e-14    2
-1.70083112e+04-2.59254163e+01 2.31803956e+00 3.17304980e-02-1.69638706e-05    3
 4.59998773e-09-5.18285520e-13-1.39382712e+04 1.71105868e+01                   4
ic3h5oh    8/ 1/95 thermc   3h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1374.00     21
 1.07381025e+01 1.31698194e-02-4.41529622e-06 6.77009837e-10-3.89608901e-14    2
-2.47298321e+04-3.13634050e+01 1.58376391e+00 3.16215366e-02-1.73664942e-05    3
 4.18927663e-09-2.79899620e-13-2.12643496e+04 1.88313766e+01                   4
tc4h8cho   9/ 7/95 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1397.00     41
```

```
 1.79663933e+01 1.94207117e-02-6.67409451e-06 1.03969221e-09-6.04702651e-14    2
-1.33368585e+04-6.79819424e+01-9.58078294e-01 6.42003258e-02-4.70776827e-05    3
 1.75737698e-08-2.64896151e-12-6.86582501e+03 3.33781112e+01                   4
o2c4h8cho  9/ 7/95 thermc   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1395.00     51
 2.12629904e+01 2.14072282e-02-7.38342949e-06 1.15281523e-09-6.71508438e-14    2
-3.16854524e+04-7.99828703e+01 1.91847699e+00 6.67245869e-02-4.80871046e-05    3
 1.78588690e-08-2.71163880e-12-2.49837984e+04 2.38577867e+01                   4
o2hc4h8co  9/ 7/95 thermc   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1394.00     61
 2.38219630e+01 1.91411448e-02-6.67919154e-06 1.05127303e-09-6.15876805e-14    2
-3.23093973e+04-9.42580755e+01 1.82607262e+00 6.93466111e-02-4.93125140e-05    3
 1.69848340e-08-2.26117657e-12-2.46578311e+04 2.41167544e+01                   4
o2hc4h7cho 9/ 7/95 thermc   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1398.00     61
 2.31414258e+01 1.94728647e-02-6.73705625e-06 1.05424893e-09-6.15106679e-14    2
-2.57830741e+04-8.88077847e+01 1.86268889e+00 7.06277093e-02-5.37134155e-05    3
 2.06342574e-08-3.18290161e-12-1.86040018e+04 2.48488797e+01                   4
c3h5oh     9/ 8/95 thermc   3h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1388.00     21
 1.02818222e+01 1.34248012e-02-4.47039448e-06 6.81924195e-10-3.90899553e-14    2
-1.99960114e+04-2.77736680e+01 1.08899314e+00 3.28481769e-02-1.91322648e-05    3
 5.21635136e-09-4.82394566e-13-1.66282463e+04 2.22754535e+01                   4
ch2cch2oh  9/ 8/95 thermc   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1372.00     21
 9.70702027e+00 1.13972660e-02-3.77993962e-06 5.75209277e-10-3.29229125e-14    2
 9.13212884e+03-2.25012933e+01 2.88422544e+00 2.42428071e-02-1.14152268e-05    3
 1.71775334e-09 1.42177454e-13 1.17935615e+04 1.52102335e+01                   4
nc3h7cho   9/27/95 thermc   4h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1378.00     31
 1.35988068e+01 1.81652474e-02-6.17844458e-06 9.55980208e-10-5.53442958e-14    2
-3.15845348e+04-4.51790228e+01 1.87415959e+00 4.19240315e-02-2.35148779e-05    3
 6.26913673e-09-6.09443908e-13-2.71032194e+04 1.91568574e+01                   4
nc3h7co    9/27/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1380.00     31
 1.30026331e+01 1.63104877e-02-5.57642899e-06 8.65670629e-10-5.02255667e-14    2
-1.25523385e+04-4.02608515e+01 2.67256826e+00 3.71198825e-02-2.06862859e-05    3
 5.48873888e-09-5.35864183e-13-8.58050888e+03 1.64848950e+01                   4
acetoch2 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
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
c2h5coch3  6/19/95 thermc   4h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1466.00     31
 1.81450718e+01 1.57522701e-02-5.67272532e-06 9.11569266e-10-5.41719472e-14    2
-3.50447157e+04-5.39091522e+01 2.65229585e+00 3.66061120e-02-4.75754779e-06    3
-9.64468834e-09 3.45604903e-12-2.82667526e+04 3.45156480e+01                   4
c4j3ooh2*o    6/27/95   c   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1394.00     51
 1.93158016e+01 1.56592602e-02-5.45395604e-06 8.57160086e-10-5.01582885e-14    2
-2.47752201e+04-6.70296581e+01 1.55204769e+00 6.08201262e-02-5.04704383e-05    3
 2.16347587e-08-3.75674081e-12-1.89563540e+04 2.71011896e+01                   4
c43ooh2*o     6/27/95   c   4h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1394.00     51
 1.97276505e+01 1.78334511e-02-6.19858596e-06 9.72831183e-10-5.68707118e-14    2
-4.98409608e+04-7.21070669e+01 6.00224213e-01 6.62792712e-02-5.44042660e-05    3
 2.32294826e-08-4.03479578e-12-4.35437668e+04 2.93367705e+01                   4
c43oo2*o      6/27/95   c   4h   7o   3    0g   300.000  5000.000 1393.00     41
 1.72170832e+01 1.76740453e-02-6.10387321e-06 9.53711693e-10-5.55757409e-14    2
-3.05280370e+04-5.67959657e+01 1.59405312e+00 5.74729487e-02-4.65071459e-05    3
 2.01816805e-08-3.61175600e-12-2.53445178e+04 2.60857480e+01                   4
ch3chcoch3 6/22/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1685.00     31
 1.07613637e+01 1.87333351e-02-6.59368444e-06 1.04870721e-09-6.20096742e-14    2
-1.51823516e+04-2.63491544e+01 2.49798069e+00 3.35071700e-02-1.38163705e-05    3
 1.10802778e-09 3.83650093e-13-1.20439071e+04 1.94105896e+01                   4
c2h3coch3  6/19/95 thermc   4h   6o   1    0g   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
ch3chco   03/03/95 thermc   3h   4o   1    0g   300.000  5000.000 1400.00     41
 1.00219123e+01 9.56966300e-03-3.26221644e-06 5.05231706e-10-2.92593257e-14    2
-1.42482738e+04-2.77829973e+01 1.48380119e+00 3.22203013e-02-2.70250033e-05    3
 1.20499164e-08-2.18365931e-12-1.15276540e+04 1.71552068e+01                   4
ch2ch2cho  6/26/95 thermc   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1371.00     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
c3h6cho-3 11/15/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1387.000    31
 1.34301738e+01 1.62250792e-02-5.60631713e-06 8.76356273e-10-5.10864241e-14    2
-1.13561098e+04-4.47371262e+01 1.35168659e+00 4.23714083e-02-2.69123192e-05    3
 8.70132567e-09-1.15287455e-12-6.91166610e+03 2.09381509e+01                   4
c3h6cho-2 11/15/95 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1682.000    31
 1.11942816e+01 1.81806772e-02-6.35916662e-06 1.00727333e-09-5.93943618e-14    2
-6.86826460e+03-2.80298956e+01 2.95067531e+00 3.34223079e-02-1.45356815e-05    3
```

```
 1.67282048e-09 2.62011555e-13-3.79034324e+03 1.74324072e+01                   4
c2h5chco   9/27/95 thermc   4h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1400.00     21
 1.34100537e+01 1.38766678e-02-4.74130143e-06 7.35504188e-10-4.26457752e-14    2
-1.83790837e+04-4.45295352e+01 2.76600655e-01 4.82966593e-02-4.02376928e-05    3
 1.76564254e-08-3.14365357e-12-1.41717351e+04 2.47118671e+01                   4
ic3h5coch3 11/14/95 therc   5h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    31
 1.57135746e+01 1.94104717e-02-6.71160542e-06 1.04957119e-09-6.12003730e-14    2
-2.65071075e+04-5.72269076e+01 8.09246454e-01 5.28377081e-02-3.55040712e-05    3
 1.24787059e-08-1.83544455e-12-2.11322752e+04 2.34120820e+01                   4
ic3h5coch2 11/14/95 therc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1391.000    31
 1.70407321e+01 1.59214786e-02-5.55063598e-06 8.72891334e-10-5.10998924e-14    2
-5.41848521e+03-6.39228376e+01 5.48800712e-01 5.64406935e-02-4.45492244e-05    3
 1.83208797e-08-3.08879949e-12 1.42569300e+02 2.39985123e+01                   4
ac3h4coch3 2/22/96 thermc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    21
 1.56880361e+01 1.74310098e-02-6.05676510e-06 9.50342951e-10-5.55458474e-14    2
-8.66309058e+03-5.67277584e+01-3.84131406e-01 5.59167204e-02-4.21424901e-05    3
 1.67314239e-08-2.75664106e-12-3.12232942e+03 2.93464240e+01                   4
sc3h5coch2 2/22/96 thermc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1392.000    21
 1.53211861e+01 1.76047889e-02-6.08492548e-06 9.51325102e-10-5.54616651e-14    2
-5.29356813e+03-5.48676823e+01 1.82685841e-01 5.43141179e-02-4.11350963e-05    3
 1.66072848e-08-2.79157742e-12-1.08451865e+02 2.60629611e+01                   4
ch3chocho 11/14/95 thermc   3h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1395.000    21
 1.27827539e+01 1.21529347e-02-4.21228103e-06 6.59844007e-10-3.85228684e-14    2
-2.15946846e+04-3.94512036e+01 5.06096897e-01 4.26121702e-02-3.37628379e-05    3
 1.39422914e-08-2.35317319e-12-1.74952136e+04 2.58742916e+01                   4
ch3chcho  12/ 1/99 thermc   3h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1385.000    21
 1.02647528E+01 1.17295061E-02-4.06267561E-06 6.36086751E-10-3.71220190E-14    2
-7.25910488E+03-2.91646638E+01 1.54196914E+00 3.03297391E-02-1.88922690E-05    3
 5.92263358E-09-7.53762316E-13-4.01761098E+03 1.83707011E+01                   4
sc3h5cho   11/15/95 therc   4h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    21
 1.31695904e+01 1.42484434e-02-4.90843998e-06 7.65789041e-10-4.45834896e-14    2
-2.04032613e+04-4.43673205e+01 4.35795171e-01 4.48719314e-02-3.36582931e-05    3
 1.33066870e-08-2.17839128e-12-1.60394651e+04 2.37597452e+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
ic3h6cho   2/22/96 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.33102250e+01 1.62097959e-02-5.57575891e-06 8.69003718e-10-5.05554202e-14    2
-7.62177931e+03-4.25050854e+01 5.21481767e-01 4.43114357e-02-2.86617314e-05    3
 9.30319894e-09-1.20761563e-12-2.99677086e+03 2.68182130e+01                   4
c3h6cho-1  9/27/95 thermc   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+03-3.92399021e+01 2.67672303e+00 3.73064128e-02-2.11281405e-05    3
 5.80472681e-09-6.09688236e-13-2.49714183e+03 1.75750933e+01                   4
etcoet     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
etcoetp    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
etcoets    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
etcoc2h3   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
petcoc2h3   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
setcoc2h3   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
ic3h6chcho 2/22/96 thermc   5h   8o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.63675823e+01 1.87451250e-02-6.45819146e-06 1.00755791e-09-5.86556682e-14    2
-2.62213524e+04-6.09272424e+01 9.93060772e-01 5.49646074e-02-3.97614860e-05    3
 1.52758656e-08-2.45467180e-12-2.08566834e+04 2.16296532e+01                   4
ic3h6chco  2/22/96 thermc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1391.000    31
 1.58085413e+01 1.66403790e-02-5.72382460e-06 8.91951253e-10-5.18812580e-14    2
-1.00869837e+04-5.71631569e+01 2.23189681e+00 5.01107112e-02-3.84870329e-05    3
 1.59662893e-08-2.76546877e-12-5.47169716e+03 1.52567763e+01                   4
ac3h5chcho 2/22/96 thermc   5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    31
```

```
 1.72875644e+01 1.57675234e-02-5.51022766e-06 8.67936068e-10-5.08670021e-14    2
-8.24598860e-03-6.63266554e-01 1.73821731e-01 5.86562259e-02-4.78711610e-05    3
 2.03690778e-08-3.54093615e-12-2.54631956e+03 2.46335643e+01                   4
iprchcoch3    3/4/96 thrmc    6h  10o    1    0g   300.000  5000.000 1386.000   41
 1.84663850e+01 2.44259450e-02-8.47213874e-06 1.32761050e-09-7.75224614e-14    2
-3.27396361e+04-7.08968496e+01 8.85427322e-01 6.25311280e-02-4.00028998e-05    3
 1.33360139e-08-1.87537015e-12-2.62281818e+04 2.47595184e+01                   4
aprchcoch3    3/4/96 thrmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1386.000   41
 1.94093580e+01 2.12803450e-02-7.43394792e-06 1.17058928e-09-6.85879838e-14    2
-1.47343669e+04-7.63296154e+01 3.32194844e-01 6.50925472e-02-4.64483778e-05    3
 1.73165694e-08-2.69407590e-12-7.95952457e+03 2.65201335e+01                   4
iprchcoch2    3/4/96 thrmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.90576522e+01 2.14419783e-02-7.45801114e-06 1.17093650e-09-6.84668640e-14    2
-1.13718745e+04-7.45617262e+01 6.52612117e-01 6.46089181e-02-4.71213384e-05    3
 1.82350555e-08-2.95881586e-12-4.90902385e+03 2.43728654e+01                   4
nc3h7coch3 2/22/96 thermc    5h   9o    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
prcoch3-1   2/22/96 thermc    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
prcoch3-2   2/22/96 thermc    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
prcoch3-3   2/22/96 thermc    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
ic3h7coch3 2/22/96 thermc    5h  10o    1    0g   300.000  5000.000 1389.000   41
 1.66064519e+01 2.32019647e-02-7.99419096e-06 1.24726904e-09-7.26144595e-14    2
-4.05445159e+04-6.23441565e+01-9.31815420e-01 6.11577694e-02-3.86369073e-05    3
 1.22337141e-08-1.55133066e-12-3.41205261e+04 3.29700276e+01                   4
ic3h7coch2 2/22/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1392.000   41
 1.71358006e+01 2.04135931e-02-7.07825623e-06 1.10904867e-09-6.47575444e-14    2
-1.91759763e+04-6.57203548e+01 1.39438834e+00 6.43760252e-02-4.76105491e-05    3
 1.84219134e-08-2.94771401e-12-1.27695653e+04 3.36240984e+01                   4
ic3h6coch3 2/22/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.61723542e+01 2.12415058e-02-7.36560280e-06 1.15405451e-09-6.73833225e-14    2
-1.55092968e+04-5.72444093e+01-4.44749274e-01 5.79587426e-02-3.82556215e-05    3
 1.30231961e-08-1.83858852e-12-9.46805936e+03 3.28465446e+01                   4
tc3h6coch3 2/22/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1384.000   41
 1.63530510e+01 2.10676490e-02-7.30082755e-06 1.14341930e-09-6.67420849e-14    2
-2.11207671e+04-6.12189536e+01 1.49496642e+00 5.23112685e-02-3.18357357e-05    3
 9.76462981e-09-1.22303232e-12-1.55329086e+04 1.99445543e+01                   4
nprcoet     2/22/96 thrmc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1378.000   51
 1.99627893e+01 2.68078451e-02-9.08527269e-06 1.40288330e-09-8.11176345e-14    2
-4.37215719e+04-7.68702768e+01 1.28300489e+00 6.70849881e-02-4.19984982e-05    3
 1.36804265e-08-1.86987155e-12-3.68039430e+04 2.48054841e+01                   4
prcoet-1    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
prcoet-2    2/22/96 trmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1369.000   51
 1.91083648e+01 2.49004438e-02-8.41246692e-06 1.29661383e-09-7.48882792e-14    2
-1.99334270e+04-6.89565390e+01 2.83974334e+00 5.59471569e-02-2.81954889e-05    3
 5.56103221e-09-1.03163981e-13-1.35531569e+04 2.09458274e+01                   4
prcoet-3    2/22/96 trmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1386.000   51
 1.93409644e+01 2.56927090e-02-8.88365538e-06 1.38917272e-09-8.09982255e-14    2
-2.33416177e+04-7.39480531e+01 8.23830406e-01 6.74626897e-02-4.57147359e-05    3
 1.66707586e-08-2.60416740e-12-1.66263615e+04 2.62565174e+01                   4
nprcoetp    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
nprcoets    2/22/96 trmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1386.000   51
 1.93409644e+01 2.56927090e-02-8.88365538e-06 1.38917272e-09-8.09982255e-14    2
-2.33416177e+04-7.39480531e+01 8.23830406e-01 6.74626897e-02-4.57147359e-05    3
 1.66707586e-08-2.60416740e-12-1.66263615e+04 2.62565174e+01                   4
iprcoet     2/22/96 thrmc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   51
 1.95742624e+01 2.79153955e-02-9.62240824e-06 1.50159041e-09-8.74272923e-14    2
-4.46495838e+04-7.64499712e+01-6.16680077e-01 7.32642523e-02-4.89979081e-05    3
 1.73849382e-08-2.61137271e-12-3.73481224e+04 3.28134678e+01                   4
iprdcoet    2/22/96 thrmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   51
 1.91427169e+01 2.5979756e-02-8.90698843e-06 1.39139804e-09-8.10704551e-14    2
-1.95812003e+04-7.12754331e+01 1.85792567e-01 6.85681889e-02-4.63201856e-05    3
 1.66403586e-08-2.53394238e-12-1.27405850e+04 3.12500304e+01                   4
tprdcoet    2/22/96 thrmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1385.000   51
 1.94096429e+01 2.56460908e-02-8.86990249e-06 1.38724701e-09-8.08943523e-14    2
-2.52544006e+04-7.58177941e+01 1.53943727e+00 6.56302319e-02-4.39137825e-05    3
 1.59015819e-08-2.48520903e-12-1.87203799e+04 2.10366385e+01                   4
iprcoetp    2/22/96 trmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   51
 1.91427169e+01 2.57997569e-02-8.90698843e-06 1.39139804e-09-8.10704551e-14    2
-1.95812003e+04-7.12754331e+01 1.85792567e-01 6.85681889e-02-4.63201856e-05    3
 1.66403586e-08-2.53394238e-12-1.27405850e+04 3.12500304e+01                   4
iprcoets    2/22/96 trmc    6h  11o    1    0g   300.000  5000.000 1391.000   51
 1.98203739e+01 2.53580298e-02-8.78518135e-06 1.37564474e-09-8.02875152e-14    2
-2.45797554e+04-7.83471052e+01-1.70558101e+00 7.60903708e-02-5.54669217e-05    3
 2.13940243e-08-3.44499097e-12-1.70692585e+04 3.72359808e+01                   4
iprcoc2h3   2/22/96 thrmc    6h  10o    1    0g   300.000  5000.000 1392.000   41
 1.92038956e+01 2.37201947e-02-8.21177710e-06 1.28526153e-09-7.49892123e-14    2
-3.09011318e+04-7.50674562e+01-1.88027262e+00 7.40623406e-02-5.50842577e-05    3
 2.15565231e-08-3.49628958e-12-2.36342856e+04 3.78714680e+01                   4
iprdcoc2h3  2/22/96 thrmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1392.000   41
 1.87930502e+01 2.15620206e-02-7.47633436e-06 1.17140015e-09-6.83971779e-14    2
-5.83727041e+03-7.00021874e+01-1.12386981e+00 6.95598415e-02-5.26647646e-05    3
 2.09440328e-08-3.44229435e-12 9.80415635e+02 3.65231635e+01                   4
tprdcoc2h3  2/22/96 thrmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1382.000   41
 1.74889119e+01 2.27387392e-02-7.89761331e-06 1.23876571e-09-7.23848454e-14    2
-7.86474852e+03-6.24862575e+01 1.88219588e+00 5.33420559e-02-2.88322044e-05    3
 6.81679158e-09-4.63504295e-13-1.79476213e+03 2.35172623e+01                   4
ic3h5coet   2/22/96 thrmc    6h  10o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.87507788e+01 2.39971118e-02-8.28168460e-06 1.29336620e-09-7.53430880e-14    2
-3.06311914e+04-7.17081859e+01 9.32448574e-01 6.57899872e-02-4.70608871e-05    3
 1.83043778e-08-3.03065842e-12-2.43309438e+04 2.41443648e+01                   4
ac3h4coet   2/22/96 thrmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1389.000   41
 1.97160567e+01 2.09105684e-02-7.28102584e-06 1.14398254e-09-6.69250385e-14    2
-1.26601703e+04-7.73334256e+01 2.22257490e-02 6.98924485e-02-5.57441882e-05    3
 2.36923195e-08-4.16823986e-12-6.00720413e+03 2.75671654e+01                   4
ic3h5coetp  2/22/96 trmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   41
 1.83242746e+01 2.18703696e-02-7.56100862e-06 1.18221142e-09-6.89246734e-14    2
-5.56408662e+03-6.65602309e+01 1.73482909e+00 6.10899133e-02-4.43710538e-05    3
 1.75466750e-08-2.94922111e-12 2.76716397e+02 2.25822178e+01                   4
ic3h5coets  2/22/96 trmc    6h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1391.000   41
 1.89823944e+01 2.13803288e-02-7.40835524e-06 1.16018120e-09-6.77175714e-14    2
-1.05407468e+04-7.34787496e+01 3.03036638e-01 6.64634913e-02-5.02432600e-05    3
 2.02128668e-08-3.38770724e-12-4.11851053e+03 2.64622328e+01                   4
nc4h9cho    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
ac3h5cho    2/29/96 thermc    4h   6o    1    0g   300.000  5000.000 1390.000   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   2/29/96 thermc    4h   5o    1    0g   300.000  5000.000 1382.000   21
 1.24074059e+01 1.27319711e-02-4.47199396e-06 7.06819922e-10-4.15245536e-14    2
 1.71706585e+03-3.94039464e+01-8.77992983e-03 3.98630509e-02-2.66130850e-05    3
 8.74644509e-09-1.14128759e-12 6.22475038e+03 2.79591664e+01                   4
c4h8cho-1   2/29/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1382.000   41
 1.62387385e+01 2.06785503e-02-7.06216576e-06 1.09553003e-09-6.35307382e-14    2
-1.05717872e+04-5.50446953e+01 2.41842832e+00 4.96272127e-02-2.94995966e-05    3
 8.76068653e-09-1.04084476e-12-5.38055616e+03 2.04609422e+01                   4
c4h8cho-2   2/29/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 2014.000   41
 1.41407667e+01 2.28357886e-02-7.96904210e-06 1.26040379e-09-7.42466834e-14    2
-1.07960087e+04-4.22099585e+01 2.67005026e+00 4.58193092e-02-2.29410393e-05    3
 4.53761436e-09-1.26593772e-13-6.67002712e+03 2.04249941e+01                   4
c4h8cho-3   2/29/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 2014.000   41
 1.41407667e+01 2.28357886e-02-7.96904210e-06 1.26040379e-09-7.42466834e-14    2
-1.07960087e+04-4.22099585e+01 2.67005026e+00 4.58193092e-02-2.29410393e-05    3
 4.53761436e-09-1.26593772e-13-6.67002712e+03 2.04249941e+01                   4
c4h8cho-4   2/29/96 thermc    5h   9o    1    0g   300.000  5000.000 1388.000   41
```

```
 1.65969615e+01 2.07196999e-02-7.14969212e-06 1.11659188e-09-6.50492039e-14    2
-1.54539499e+04-6.03180192e+01 1.16494271e+00 5.43945461e-02-3.49000792e-05    3
 1.14582711e-08-1.54697375e-12-9.80619729e+03 2.34897110e+01                   4
neoc5h9q2  7/13/98 thermc    5h  11o    4    0g   300.000  5000.000 1392.000   81
 2.66237918e+01 2.35199670e-02-8.18090023e-06 1.28470699e-09-7.51386130e-14    2
-2.82527679e+04-1.04281343e+02 2.52870717e+00 7.91129172e-02-5.67340017e-05    3
 2.03917093e-08-2.93751247e-12-1.98622782e+04 2.52933399e+01                   4
neoc5h9q2-n 7/13/98 thermc    5h  11o    4    0g   300.000  5000.000 1398.000   81
 2.75724303e+01 2.25185371e-02-7.79058431e-06 1.21898256e-09-7.11135534e-14    2
-3.07842179e+04-1.08642160e+02 4.90356976e+00 7.58119192e-02-5.54217844e-05    3
 2.04651294e-08-3.03737744e-12-2.30019993e+04 1.28890567e+01                   4
ic4h6q2-ii  3/27/97 thermc    4h   8o    4    0g   300.000  5000.000 1395.000   61
 2.24051581e+01 1.75562429e-02-6.07364156e-06 9.50166957e-10-5.54197350e-14    2
-3.21818575e+04-8.09661209e+01 5.23327960e+00 6.08735678e-02-4.90787099e-05    3
 2.07966368e-08-3.60550230e-12-2.64988062e+04 1.01881862e+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
nc6h14      1/14/95 thermc    6h  14    0    0g   300.000  5000.000 1390.00   51
 1.89634117e+01 3.04480204e-02-1.03794829e-05 1.60775457e-09-9.31269728e-14    2
-3.01628739e+04-7.62839355e+01-9.69606179e-01 7.29085608e-02-4.38853919e-05    3
 1.32312807e-08-1.58437423e-12-2.27803862e+04 3.23069798e+01                   4
c6h12-1     2/14/95     c   6h  12    0    0g   300.000  5000.000 1392.00   41
 1.78337529e+01 2.67377658e-02-9.10036773e-06 1.40819768e-09-8.15124244e-14    2
-1.42062860e+04-6.83818851e+01-1.35275205e+00 6.98655426e-02-4.59408022e-05    3
 1.56967343e-08-2.21296175e-12-7.34368617e+03 3.53120691e+01                   4
c6h12-2     2/14/95     c   6h  12    0    0g   300.000  5000.000 1390.00   41
 1.73616148e+01 2.71634902e-02-9.25249439e-06 1.43247725e-09-8.29472521e-14    2
-1.55509547e+04-6.61857343e+01-8.37810520e-01 6.64334712e-02-4.08801772e-05    3
 1.27558015e-08-1.60665165e-12-8.86347329e+03 3.27785200e+01                   4
c6h12-3     2/14/95     c   6h  12    0    0g   300.000  5000.000 1392.00   41
 1.74392115e+01 2.72012909e-02-9.28739405e-06 1.44011755e-09-8.34782517e-14    2
-1.55311520e+04-6.72316177e+01-1.74471739e+00 7.02087492e-02-4.60836866e-05    3
 1.58225609e-08-2.26113570e-12-8.63510107e+03 3.65273503e+01                   4
c6h11       2/14/95     c   6h  11    0    0g   300.000  5000.000 1388.00   41
 1.73781063e+01 2.52715626e-02-8.74710351e-06 1.36884407e-09-7.98569285e-14    2
 1.33730775e+03-6.77269441e+01-1.78981302e+00 6.71660911e-02-4.34180588e-05    3
 1.43931014e-08-1.96953043e-12 8.35230470e+03 3.63570478e+01                   4
c6h12o1-2   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1390.00   41
 1.98237675e+01 2.83076305e-02-9.79700725e-06 1.53290291e-09-8.94136512e-14    2
-2.86156250e+04-8.97147353e+01-2.60027118e+00 8.25140327e-02-6.19868951e-05    3
 2.52986585e-08-4.35196287e-12-2.08474661e+04 4.03432783e+01                   4
c6h12o1-3   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1381.00   31
 2.00943213e+01 2.80281041e-02-9.61073019e-06 1.49563556e-09-8.69482515e-14    2
-2.94623491e+04-8.29672080e+01-3.67890943e+00 8.18734230e-02-5.65067852e-05    3
 2.03434434e-08-3.05338137e-12-2.09644147e+04 4.54357891e+01                   4
c6h12o1-4   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1385.00   21
 1.81937451e+01 3.05132082e-02-1.05538621e-05 1.65081301e-09-9.62756740e-14    2
-3.91861539e+04-7.28892157e+01-4.98759747e+00 8.36690743e-02-5.83931131e-05    3
 2.19383204e-08-3.51302429e-12-3.08768470e+04 5.22311756e+01                   4
c6h12o1-5   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1369.00   11
 2.18696492e+01 2.89644808e-02-1.02843212e-05 1.63714319e-09-9.66552991e-14    2
-4.43407005e+04-1.01256926e+02-4.89881418e+00 8.17946607e-02-4.67358620e-05    3
 1.15229724e-08-9.38137353e-13-3.39937629e+04 4.60903286e+01                   4
c6h12o2-3   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1392.00   41
 2.04400807e+01 2.77275705e-02-9.58422558e-06 1.49835476e-09-8.73476387e-14    2
-3.09571014e+04-8.33771795e+01-3.24328996e+00 8.73751851e-02-6.95553645e-05    3
 2.98574354e-08-5.31644810e-12-2.30127954e+04 4.25385508e+01                   4
c6h12o2-4   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1388.00   31
 1.99501923e+01 2.88253331e-02-1.00217930e-05 1.57295064e-09-9.19508743e-14    2
-3.15674310e+04-8.24846912e+01-3.75894138e+00 8.46044396e-02-6.18101303e-05    3
 2.42424607e-08-4.01441141e-12-2.32216305e+04 4.49636341e+01                   4
c6h12o2-5   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1388.00   21
 1.86455632e+01 3.02705842e-02-1.05000692e-05 1.64542415e-09-9.60802316e-14    2
-4.14905135e+04-7.56801716e+01-5.21438722e+00 8.67847640e-02-6.36083019e-05    3
 2.52625812e-08-4.25063214e-12-3.31071531e+04 5.24812152e+01                   4
c6h12o3-4   1/22/95 thermc    6h  12o    1    0g   300.000  5000.000 1392.00   41
 2.04400807e+01 2.77275705e-02-9.58422558e-06 1.49835476e-09-8.73476387e-14    2
-3.09571014e+04-8.33771795e+01-3.24328996e+00 8.73751851e-02-6.95553645e-05    3
 2.98574354e-08-5.31644810e-12-2.30127954e+04 4.25385508e+01                   4
nc7h16      2/10/95     c   7h  16    0    0g   300.000  5000.000 1391.000   61
 2.22148969e+01 3.47675750e-02-1.18407129e-05 1.83298478e-09-1.06130266e-13    2
-3.42760081e+04-9.23040196e+01-1.26836187e+00 8.54355820e-02-5.25346786e-05    3
 1.62945721e-08-2.02394925e-12-2.56586565e+04 3.53732912e+01                   4
c7h15-1     2/10/95     c   7h  15    0    0g   300.000  5000.000 1390.000   61
 2.17940709e+01 3.26280243e-02-1.11138244e-05 1.72067148e-09-9.96366999e-14    2
-9.20938221e+03-8.64954311e+01-4.99570406e-01 8.08826467e-02-5.00532754e-05    3
 1.56549308e-08-1.96616227e-12-1.04590223e+03 3.46564011e+01                   4
c7h15-2     2/10/95     c   7h  15    0    0g   300.000  5000.000 1382.000   61
 2.16368842e+01 3.23324804e-02-1.09273807e-05 1.68357060e-09-9.71774091e-14    2
-1.05873616e+04-8.52209653e+01-3.79155767e-02 7.56726570e-02-4.07473634e-05    3
 9.32678943e-09-4.92360745e-13-2.35605303e+03 3.37321506e+01                   4
c7h15-3     2/10/95     c   7h  15    0    0g   300.000  5000.000 1382.000   61
 2.16368842e+01 3.23324804e-02-1.09273807e-05 1.68357060e-09-9.71774091e-14    2
-1.05873616e+04-8.52209653e+01-3.79155767e-02 7.56726570e-02-4.07473634e-05    3
 9.32678943e-09-4.92360745e-13-2.35605303e+03 3.37321506e+01                   4
c7h15-4     2/10/95     c   7h  15    0    0g   300.000  5000.000 1382.000   61
 2.16368842e+01 3.23324804e-02-1.09273807e-05 1.68357060e-09-9.71774091e-14    2
-1.05873616e+04-8.59104470e+01-3.79155767e-02 7.56726570e-02-4.07473634e-05    3
 9.32678943e-09-4.92360745e-13-2.35605303e+03 3.30426690e+01                   4
c7h14-1     2/10/95     c   7h  14    0    0g   300.000  5000.000 1392.000   51
 2.10898039e+01 3.10607878e-02-1.05644793e-05 1.63405780e-09-9.45598219e-14    2
-1.83260065e+04-8.44391108e+01-1.67720549e+00 8.24611601e-02-5.46504108e-05    3
 1.87862303e-08-2.65737983e-12-1.02168601e+04 3.85068032e+01                   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
c7h13       2/10/95     c   7h  13    0    0g   300.000  5000.000 1392.000   41
 0.18844944E+02 0.28945625E-01-0.85118299E-05 0.12267795E-08-0.70600881E-13    2
-0.58337109E+03-0.70077919E+02-0.25681350E+00 0.73909260E-01-0.44674496E-04    3
 0.12783608E-07-0.13304313E-11 0.54535488E+04 0.31452728E+02                   4
c7h15o2-1   7/23/98 thermc    7h  15o    2    0g   300.000  5000.000 1390.000   71
 2.49023689e+01 3.50716920e-02-1.20440306e-05 1.87464822e-09-1.08947791e-13    2
-2.82976050e+04-9.73923542e+01 2.37499334e+00 8.34651906e-02-5.13897320e-05    3
 1.64217662e-08-2.19505216e-12-1.99237961e+04 2.53067342e+01                   4
c7h15o2-2   7/23/98 thermc    7h  15o    2    0g   300.000  5000.000 1392.000   71
 2.52622017e+01 3.46652053e-02-1.18812593e-05 1.84687322e-09-1.07234165e-13    2
-3.05051074e+04-1.00675588e+02 1.51378168e+00 8.85572745e-02-5.92457147e-05    3
 2.11801862e-08-3.20741722e-12-2.19818400e+04 2.76255370e+01                   4
c7h15o2-3   7/23/98 thermc    7h  15o    2    0g   300.000  5000.000 1392.000   71
 2.52622017e+01 3.46652053e-02-1.18812593e-05 1.84687322e-09-1.07234165e-13    2
-3.05051074e+04-1.00675588e+02 1.51378168e+00 8.85572745e-02-5.92457147e-05    3
 2.11801862e-08-3.20741722e-12-2.19818400e+04 2.76255370e+01                   4
c7h15o2-4   7/23/98 thermc    7h  15o    2    0g   300.000  5000.000 1392.000   71
 2.52622017e+01 3.46652053e-02-1.18812593e-05 1.84687322e-09-1.07234165e-13    2
-3.05051074e+04-1.01365070e+02 1.51378168e+00 8.85572745e-02-5.92457147e-05    3
 2.11801862e-08-3.20741722e-12-2.19818400e+04 2.69360553e+01                   4
c7h15o2h-1  7/23/98 thermc    7h  16o    2    0g   300.000  5000.000 1391.000   81
 2.73495733e+01 3.52545289e-02-1.21399643e-05 1.89323260e-09-1.10181893e-13    2
-4.64103498e+04-1.11617766e+02 1.50495380e+00 9.18579072e-02-5.89020045e-05    3
 1.93151334e-08-2.59456017e-12-3.69871515e+04 2.86394003e+01                   4
c7h15o2h-2  7/23/98 thermc    7h  16o    2    0g   300.000  5000.000 1393.000   81
 2.77098165e+01 3.48487880e-02-1.19777002e-05 1.86556340e-09-1.08475524e-13    2
-4.86189131e+04-1.14905489e+02 6.29165042e-01 9.70053636e-02-6.68336695e-05    3
 2.41186253e-08-3.61669837e-12-3.90427262e+04 3.10277331e+01                   4
c7h15o2h-3  7/23/98 thermc    7h  16o    2    0g   300.000  5000.000 1393.000   81
 2.77098165e+01 3.48487880e-02-1.19777002e-05 1.86556340e-09-1.08475524e-13    2
-4.86189131e+04-1.14905489e+02 6.29165042e-01 9.70053636e-02-6.68336695e-05    3
 2.41186253e-08-3.61669837e-12-3.90427262e+04 3.10277331e+01                   4
c7h15o2h-4  7/23/98 thermc    7h  16o    2    0g   300.000  5000.000 1393.000   81
 2.77098165e+01 3.48487880e-02-1.19777002e-05 1.86556340e-09-1.08475524e-13    2
-4.86189131e+04-1.15594970e+02 6.29165042e-01 9.70053636e-02-6.68336695e-05    3
 2.41186253e-08-3.61669837e-12-3.90427262e+04 3.03382515e+01                   4
c7h15o-1    2/10/95     c   7h  15o    1    0g   300.000  5000.000 1391.000   71
 2.36489937e+01 3.38195865e-02-1.15717686e-05 1.79692111e-09-1.04265757e-13    2
-2.65280214e+04-9.48882293e+01-4.59189934e-01 8.74464647e-02-5.69015135e-05    3
 1.93195908e-08-2.68753465e-12-1.78233113e+04 3.56475170e+01                   4
c7h15o-2    2/10/95     c   7h  15o    1    0g   300.000  5000.000 1395.000   71
 2.43070968e+01 3.31267815e-02-1.13034023e-05 1.75198875e-09-1.01526943e-13    2
-2.88623481e+04-9.87360860e+01-1.09087925e+00 9.23217022e-02-6.44477835e-05    3
 2.36808474e-08-3.61067567e-12-1.99926675e+04 3.77738325e+01                   4
c7h15o-3    2/10/95     c   7h  15o    1    0g   300.000  5000.000 1395.000   71
 2.43070968e+01 3.31267815e-02-1.13034023e-05 1.75198875e-09-1.01526943e-13    2
-2.88623481e+04-9.87360860e+01-1.09087925e+00 9.23217022e-02-6.44477835e-05    3
 2.36808474e-08-3.61067567e-12-1.99926675e+04 3.77738325e+01                   4
c7h15o-4    2/10/95     c   7h  15o    1    0g   300.000  5000.000 1395.000   71
```

```
 2.43070968e+01 3.31267815e-02-1.13034023e-05 1.75198875e-09-1.01526943e-13    2
-2.88623481e+04-9.94255677e+01-1.09087925e+00 9.23217022e-02-6.44477835e-05    3
 2.36808474e-08-3.61067567e-12-1.99926675e+04 3.70843509e+01                   4
c7h14ooh1-2 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 2.70028807e+01 3.22272216e-02-1.09366516e-05 1.68977918e-09-9.77321946e-14    2
-2.27229231e+04-1.06332170e+02 2.49875186e+00 8.32443344e-02-4.85933986e-05    3
 1.28927950e-08-1.09878385e-12-1.36530733e+04 2.73754005e+01                   4
c7h14ooh1-3 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 2.70028807e+01 3.22272216e-02-1.09366516e-05 1.68977918e-09-9.77321946e-14    2
-2.27229231e+04-1.06332170e+02 2.49875186e+00 8.32443344e-02-4.85933986e-05    3
 1.28927950e-08-1.09878385e-12-1.36530733e+04 2.73754005e+01                   4
c7h14ooh1-4 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 2.70028807e+01 3.22272216e-02-1.09366516e-05 1.68977918e-09-9.77321946e-14    2
-2.27229231e+04-1.06332170e+02 2.49875186e+00 8.32443344e-02-4.85933986e-05    3
 1.28927950e-08-1.09878385e-12-1.36530733e+04 2.73754005e+01                   4
c7h14ooh1-5 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 2.70028807e+01 3.22272216e-02-1.09366516e-05 1.68977918e-09-9.77321946e-14    2
-2.27229231e+04-1.06332170e+02 2.49875186e+00 8.32443344e-02-4.85933986e-05    3
 1.28927950e-08-1.09878385e-12-1.36530733e+04 2.73754005e+01                   4
c7h14ooh2-1 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000    81
 2.72931159e+01 3.27034748e-02-1.12483701e-05 1.75282538e-09-1.01955579e-13    2
-2.35554130e+04-1.09813224e+02 1.37396160e+00 9.25294066e-02-6.44403647e-05    3
 2.35223293e-08-3.56678305e-12-1.44255429e+04 2.97386718e+01                   4
c7h14ooh2-3 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh2-4 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh2-5 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh2-6 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh3-1 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000    81
 2.72931159e+01 3.27034748e-02-1.12483701e-05 1.75282538e-09-1.01955579e-13    2
-2.35554130e+04-1.09813224e+02 1.37396160e+00 9.25294066e-02-6.44403647e-05    3
 2.35223293e-08-3.56678305e-12-1.44255429e+04 2.97386718e+01                   4
c7h14ooh3-2 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh3-4 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh3-5 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh3-6 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.09739277e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.97815441e+01                   4
c7h14ooh3-7 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000    81
 2.72931159e+01 3.27034748e-02-1.12483701e-05 1.75282538e-09-1.01955579e-13    2
-2.35554130e+04-1.09813224e+02 1.37396160e+00 9.25294066e-02-6.44403647e-05    3
 2.35223293e-08-3.56678305e-12-1.44255429e+04 2.97386718e+01                   4
c7h14ooh4-1 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000    81
 2.72931159e+01 3.27034748e-02-1.12483701e-05 1.75282538e-09-1.01955579e-13    2
-2.35554130e+04-1.10502705e+02 1.37396160e+00 9.25294066e-02-6.44403647e-05    3
 2.35223293e-08-3.56678305e-12-1.44255429e+04 2.90491902e+01                   4
c7h14ooh4-2 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.10428759e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.90920624e+01                   4
c7h14ooh4-3 7/23/98 thrmc    7h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.73843966e+01 3.17800796e-02-1.07557689e-05 1.65881427e-09-9.58200506e-14    2
-2.49404488e+04-1.10428759e+02 1.62083964e+00 8.83636215e-02-5.64527235e-05    3
 1.76325999e-08-2.10369342e-12-1.57072842e+04 2.90920624e+01                   4
c7h14ooh1-2o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh1-3o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh1-4o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh1-5o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh2-1o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh2-3o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh2-4o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh2-5o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh2-6o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh3-1o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh3-2o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh3-4o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh3-5o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh3-6o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh3-7o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh4-1o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.23937788e+01 3.33911097e-02-1.15672104e-05 1.81146023e-09-1.05739941e-13    2
-4.36321048e+04-1.32597311e+02 3.84933185e+00 9.45955097e-02-5.94934121e-05    3
 1.78836457e-08-2.00618696e-12-3.32051631e+04 2.25912030e+01                   4
c7h14ooh4-2o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14ooh4-3o2 7/23/98 tmc    7h  15o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.27436761e+01 3.30060143e-02-1.14146253e-05 1.78556283e-09-1.04147126e-13    2
-4.58332974e+04-1.35817581e+02 3.09603698e+00 9.93182239e-02-6.69045928e-05    3
 2.24191270e-08-2.97843662e-12-3.52824732e+04 2.43873873e+01                   4
c7h14o1-2  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1395.000    51
 2.37000144e+01 3.19736196e-02-1.10051915e-05 1.71573269e-09-9.98299292e-14    2
-3.29513289e+04-9.82875052e+01-3.81099002e+00 9.88275901e-02-7.45611004e-05    3
 2.97911410e-08-4.92830063e-12-2.35902179e+04 4.86553339e+01                   4
c7h14o1-3  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
c7h14o1-4  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000    31
 2.31118905e+01 3.33659362e-02-1.14966228e-05 1.79372703e-09-1.04427245e-13    2
-4.38631326e+04-9.93440338e+01-7.67475343e+00 1.08451023e-01-8.27531084e-05    3
 3.30380469e-08-5.41492429e-12-3.34640974e+04 6.49157213e+01                   4
c7h14o1-5  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1399.000    21
 2.28090143e+01 3.39125257e-02-1.16560154e-05 1.81563398e-09-1.05584520e-13    2
-4.69608758e+04-1.01439267e+02-8.08057119e+00 1.07770518e-01-7.96269386e-05    3
 3.04530201e-08-4.75685662e-12-3.64257637e+04 6.38156541e+01                   4
c7h14o2-3  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000    51
 2.46307403e+01 3.11695968e-02-1.07258436e-05 1.67199961e-09-9.72807983e-14    2
-3.54766577e+04-1.03890698e+02-4.47550411e+00 1.03076280e-01-8.00239901e-05    3
 3.25526196e-08-5.42645693e-12-2.57371873e+04 5.10770545e+01                   4
c7h14o2-4  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
c7h14o2-5  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1400.000    31
 2.36576563e+01 3.26661812e-02-1.12033725e-05 1.74258165e-09-1.01232864e-13    2
-4.61139813e+04-1.02440732e+02-7.32465040e+00 1.09089081e-01-8.42725073e-05    3
 3.38514638e-08-5.54204874e-12-3.57842594e+04 6.24742748e+01                   4
c7h14o2-6  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1400.000    21
 2.34283967e+01 3.33350283e-02-1.14454751e-05 1.78159357e-09-1.03554968e-13    2
-4.93092037e+04-1.05130752e+02-8.75347527e+00 1.12726239e-01-8.73224432e-05    3
 3.50949636e-08-5.74162472e-12-3.85854184e+04 6.61579567e+01                   4
c7h14o3-4  2/10/95       c   7h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000    51
 2.46307403e+01 3.11695968e-02-1.07258436e-05 1.67199961e-09-9.72807983e-14    2
-3.54766577e+04-1.03890698e+02-4.47550411e+00 1.03076280e-01-8.00239901e-05    3
 3.25526196e-08-5.42645693e-12-2.57371873e+04 5.10770545e+01                   4
c7h14o3-5  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
nc7ket12   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1396.000    81
 2.97472906e+01 3.06622294e-02-1.05563590e-05 1.64627343e-09-9.58171675e-14    2
-5.66856828e+04-1.22432490e+02 5.82433697e-01 1.01207869e-01-7.65855996e-05    3
 3.00738606e-08-4.82902792e-12-4.68054419e+04 3.33331449e+01                   4
nc7ket13   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.85888117e+01 3.15562212e-02-1.08440166e-05 1.68894899e-09-9.82098038e-14    2

-5.81497451e+04-1.15032511e+02 3.02737415e+00 9.05777002e-02-6.33607268e-05    3
 2.32162136e-08-3.53384105e-12-4.91487120e+04 2.25860013e+01                   4
nc7ket14   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.85888117e+01 3.15562212e-02-1.08440166e-05 1.68894899e-09-9.82098038e-14    2
-5.81497451e+04-1.15032511e+02 3.02737415e+00 9.05777002e-02-6.33607268e-05    3
 2.32162136e-08-3.53384105e-12-4.91487120e+04 2.25860013e+01                   4
nc7ket15   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.85888117e+01 3.15562212e-02-1.08440166e-05 1.68894899e-09-9.82098038e-14    2
-5.81497451e+04-1.15032511e+02 3.02737415e+00 9.05777002e-02-6.33607268e-05    3
 2.32162136e-08-3.53384105e-12-4.91487120e+04 2.25860013e+01                   4
nc7ket21   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1393.000    81
 2.90867641e+01 3.12881743e-02-1.07852814e-05 1.68325182e-09-9.80172385e-14    2
-5.80490338e+04-1.18099430e+02 3.44441437e-01 1.02156055e-01-7.93433482e-05    3
 3.25322525e-08-5.49715778e-12-4.83723073e+04 3.50571669e+01                   4
nc7ket23   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.94068890e+01 3.11132474e-02-1.07475750e-05 1.67981822e-09-9.79195344e-14    2
-6.04319021e+04-1.21313991e+02 1.97237667e-01 1.01003617e-01-7.54631627e-05    3
 2.92849376e-08-4.66295964e-12-5.04393242e+04 3.49969216e+01                   4
nc7ket24   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.82068850e+01 3.20833500e-02-1.10699870e-05 1.72876170e-09-1.00709919e-13    2
-6.18824724e+04-1.13686529e+02 2.69842062e+00 9.01458551e-02-6.19413386e-05    3
 2.22789039e-08-3.34178948e-12-5.27915898e+04 2.39852490e+01                   4
nc7ket25   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.82068850e+01 3.20833500e-02-1.10699870e-05 1.72876170e-09-1.00709919e-13    2
-6.18824724e+04-1.13686529e+02 2.69842062e+00 9.01458551e-02-6.19413386e-05    3
 2.22789039e-08-3.34178948e-12-5.27915898e+04 2.39852490e+01                   4
nc7ket26   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.82068850e+01 3.20833500e-02-1.10699870e-05 1.72876170e-09-1.00709919e-13    2
-6.18824724e+04-1.13686529e+02 2.69842062e+00 9.01458551e-02-6.19413386e-05    3
 2.22789039e-08-3.34178948e-12-5.27915898e+04 2.39852490e+01                   4
nc7ket31   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.79110835e+01 3.22465428e-02-1.11080316e-05 1.73289508e-09-1.00880504e-13    2
-5.97622360e+04-1.10365114e+02 3.68813236e+00 8.66822494e-02-5.84182707e-05    3
 2.08545324e-08-3.15008235e-12-5.10084351e+04 2.07041129e+01                   4
nc7ket32   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1392.000    81
 2.93483957e+01 3.11049077e-02-1.07311701e-05 1.67579269e-09-9.76240849e-14    2
-6.04805074e+04-1.20609073e+02 3.48224628e-01 1.02657937e-01-8.00268737e-05    3
 3.29012562e-08-5.57165153e-12-5.07205435e+04 3.39067009e+01                   4
nc7ket34   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1392.000    81
 2.93483957e+01 3.11049077e-02-1.07311701e-05 1.67579269e-09-9.76240849e-14    2
-6.04805074e+04-1.20609073e+02 3.48224628e-01 1.02657937e-01-8.00268737e-05    3
 3.29012562e-08-5.57165153e-12-5.07205435e+04 3.39067009e+01                   4
nc7ket35   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.82068850e+01 3.20833500e-02-1.10699870e-05 1.72876170e-09-1.00709919e-13    2
-6.18824724e+04-1.13686529e+02 2.69842062e+00 9.01458551e-02-6.19413386e-05    3
 2.22789039e-08-3.34178948e-12-5.27915898e+04 2.39852490e+01                   4
nc7ket36   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    81
 2.82068850e+01 3.20833500e-02-1.10699870e-05 1.72876170e-09-1.00709919e-13    2
-6.18824724e+04-1.13686529e+02 2.69842062e+00 9.01458551e-02-6.19413386e-05    3
 2.22789039e-08-3.34178948e-12-5.27915898e+04 2.39852490e+01                   4
nc7ket37   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.79110835e+01 3.22465428e-02-1.11080316e-05 1.73289508e-09-1.00880504e-13    2
-5.97622360e+04-1.10365114e+02 3.68813236e+00 8.66822494e-02-5.84182707e-05    3
 2.08545324e-08-3.15008235e-12-5.10084351e+04 2.07041129e+01                   4
nc7ket41   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.79110835e+01 3.22465428e-02-1.11080316e-05 1.73289508e-09-1.00880504e-13    2
-5.97622360e+04-1.10365114e+02 3.68813236e+00 8.66822494e-02-5.84182707e-05    3
 2.08545324e-08-3.15008235e-12-5.10084351e+04 2.07041129e+01                   4
nc7ket42   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    81
 2.82722993e+01 3.18336613e-02-1.09420284e-05 1.70451864e-09-9.91282349e-14    2
-6.19707814e+04-1.13656794e+02 2.79961812e+00 9.18777171e-02-6.64218079e-05    3
 2.57008201e-08-4.18119784e-12-5.30617949e+04 2.31534700e+01                   4
nc7ket43   7/23/98 thermc    7h  14o   3    0g   300.000  5000.000 1392.000    81
 2.93483957e+01 3.11049077e-02-1.07311701e-05 1.67579269e-09-9.76240849e-14    2
-6.04805074e+04-1.20609073e+02 3.48224628e-01 1.02657937e-01-8.00268737e-05    3
 3.29012562e-08-5.57165153e-12-5.07205435e+04 3.39067009e+01                   4
nc5h11cho  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
nc5h11co   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
c5h10cho-1 2/29/96 thermc    6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1383.000    51
 1.94701427e+01 2.50490154e-02-8.54838759e-06 1.32543025e-09-7.68369090e-14    2
-1.46878327e+04-7.09736169e+01 2.15377345e+00 6.19684203e-02-3.78904723e-05    3
 1.17022892e-08-1.46276094e-12-8.26278569e+03 2.33779159e+01                   4
c5h10cho-2 2/29/96 thermc    6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1371.000    51
 2.01227062e+01 2.38797102e-02-8.02929509e-06 1.23389172e-09-7.11284276e-14    2
-1.74161761e+04-7.48168825e+01 4.16999842e-01 6.37354262e-02-3.53661717e-05    3
 7.90793428e-09-2.83991537e-13-1.00633239e+04 3.30278698e+01                   4
c5h10cho-3 2/29/96 thermc    6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1371.000    51
 2.01227062e+01 2.38797102e-02-8.02929509e-06 1.23389172e-09-7.11284276e-14    2
-1.74161761e+04-7.48168825e+01 4.16999842e-01 6.37354262e-02-3.53661717e-05    3
 7.90793428e-09-2.83991537e-13-1.00633239e+04 3.30278698e+01                   4
c5h10cho-4 2/29/96 thermc    6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1371.000    51
 2.01227062e+01 2.38797102e-02-8.02929509e-06 1.23389172e-09-7.11284276e-14    2
-1.74161761e+04-7.48168825e+01 4.16999842e-01 6.37354262e-02-3.53661717e-05    3
 7.90793428e-09-2.83991537e-13-1.00633239e+04 3.30278698e+01                   4
c5h10cho-5 2/29/96 thermc    6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1395.000    51
 2.02669246e+01 2.47914857e-02-8.54953747e-06 1.33477274e-09-7.77453379e-14    2
-2.07889535e+04-7.93060747e+01-1.26556708e+00 7.36551339e-02-5.04263913e-05    3
 1.74734247e-08-2.44116609e-12-1.31838221e+04 3.68187516e+01                   4
c4h7cho1-4 5/ 6/96 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
c4h7co1-4  5/ 6/96 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
c4h6cho1-43 5/ 6/96 thrmc    5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1382.000    31
 1.54178855e+01 1.71672536e-02-5.95214751e-06 9.32713368e-10-5.44705237e-14    2
-2.75958461e+03-5.37764772e+01 1.13728412e+00 4.85677415e-02-3.21395914e-05    3
 1.08714802e-08-1.51624448e-12 2.44080824e+03 2.36917499e+01                   4
c4h6cho1-44 5/ 6/96 thrmc    5h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    31
 1.54721595e+01 1.70164879e-02-5.87513255e-06 9.17941359e-10-5.34945363e-14    2
 4.99122207e+02-5.31445505e+01 7.50037894e-01 5.14805714e-02-3.71071056e-05    3
 1.40009579e-08-2.19006703e-12 5.63542979e+03 2.59488465e+01                   4
nc4h9coch3 2/22/96 thermc    6h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1384.000    51
 1.93396071e+01 2.80294129e-02-9.64367685e-06 1.50309259e-09-8.74431874e-14    2
-4.34308987e+04-7.38144199e+01 1.04489132e+00 6.62869241e-02-3.94849702e-05    3
 1.19083422e-08-1.47157105e-12-3.65200950e+04 2.62126637e+01                   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
```

```
c4h8coch3-1 2/22/96 thrmc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1384.000     51
 1.89006813e+01 2.59288818e-02-8.93525037e-06 1.39416390e-09-8.11664734e-14    2
-1.83595544e+04-6.85988070e+01 1.83079991e+00 6.16869509e-02-3.69733811e-05    3
 1.12792095e-08-1.42170745e-12-1.19106373e+04 2.47213709e+01                   4
c4h8coch3-2 2/22/96 thrmc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1365.000     51
 1.92472410e+01 2.47394219e-02-8.34917480e-06 1.28606717e-09-7.42515416e-14    2
-1.98964461e+04-7.00732125e+01 2.32442247e+00 5.60360489e-02-2.62897892e-05    3
 3.55349257e-09 4.62560403e-13-1.32203258e+04 2.36967419e+01                   4
c4h8coch3-3 2/22/96 thrmc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1365.000     51
 1.92472410e+01 2.47394219e-02-8.34917480e-06 1.28606717e-09-7.42515416e-14    2
-1.98964461e+04-7.00732125e+01 2.32442247e+00 5.60360489e-02-2.62897892e-05    3
 3.55349257e-09 4.62560403e-13-1.32203258e+04 2.36967419e+01                   4
c4h8coch3-4 2/22/96 thrmc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1387.000     51
 1.94544114e+01 2.56278187e-02-8.86916402e-06 1.38780777e-09-8.09574343e-14    2
-2.33097365e+04-7.49578200e+01 4.64936924e-01 6.68009275e-02-4.26203243e-05    3
 1.39372398e-08-1.88407814e-12-1.63159454e+04 2.82932537e+01                   4
c4h7ooh1-4  4/1/96 thermc   4h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000     41
 1.66978343e+01 1.80578399e-02-6.22476839e-06 9.71479434e-10-5.65686551e-14    2
-1.85344720e+04-5.76609547e+01 1.79804670e+00 5.23302551e-02-3.64638246e-05    3
 1.31971888e-08-1.97165993e-12-1.32846748e+04 2.25862038e+01                   4
c4h7o1-4   4/ 1/96 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1393.000     21
 1.31417783e+01 1.64166051e-02-5.56949199e-06 8.60114769e-10-4.97230006e-14    2
 1.67967537e+03-4.16160087e+01-2.92647947e-01 4.83149119e-02-3.48133220e-05    3
 1.31921468e-08-2.06485553e-12 6.29978883e+03 3.03629978e+01                   4
c5h9ooh1-4 3/27/97 thermc   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1397.000     51
 2.02179950e+01 2.21511744e-02-7.60711244e-06 1.18420679e-09-6.88331594e-14    2
-2.44297406e+04-7.58287543e+01 7.67782330e-01 6.93519317e-02-5.21650213e-05    3
 2.06237355e-08-3.35844189e-12-1.78318101e+04 2.80373555e+01                   4
c5h9o1-4   3/28/97 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1398.000     31
 1.66809382e+01 2.07591828e-02-7.09289768e-06 1.10031617e-09-6.37992567e-14    2
-4.67568455e+03-5.95056483e+01-8.53018802e-01 6.41880432e-02-4.91931508e-05    3
 2.00188214e-08-3.35963237e-12 1.19509504e+03 3.38333616e+01                   4
c5h9ooh1-5 3/27/97 thermc   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1393.000     51
 1.98575596e+01 2.25572969e-02-7.76951451e-06 1.21189491e-09-7.05404248e-14    2
-2.26275637e+04-7.31968346e+01 1.65166493e+00 6.41855434e-02-4.42152137e-05    3
 1.58117718e-08-2.33469388e-12-1.61856012e+04 2.49485316e+01                   4
c5h9o1-5   3/28/97 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1394.000     31
 1.62564642e+01 2.10561226e-02-7.18323965e-06 1.11331434e-09-6.45162851e-14    2
-2.41003213e+03-5.69404193e+01-6.08379884e-01 6.09139191e-02-4.36395120e-05    3
 1.64966933e-08-2.58694444e-12 3.42450558e+03 3.35104649e+01                   4
c6h11ooh1-4 3/27/97 thrmc   6h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1397.000     61
 2.33879230e+01 2.66182814e-02-9.13553672e-06 1.42154300e-09-8.26043195e-14    2
-2.85211117e+04-9.14098376e+01 6.08693415e-01 8.12533376e-02-5.99544347e-05    3
 2.32306975e-08-3.71302106e-12-2.07306507e+04 3.04600742e+01                   4
c6h11o1-4  3/28/97 thermc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000     41
 1.99304018e+01 2.50878998e-02-8.55881248e-06 1.32642733e-09-7.68596330e-14    2
-8.79248519e+03-7.55242129e+01-1.17611678e+00 7.67820021e-02-5.79189808e-05    3
 2.31283510e-08-3.81018248e-12-1.67830272e+03 3.70214234e+01                   4
c6h11ooh1-5 3/27/97 thrmc   6h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1397.000     61
 2.33879230e+01 2.66182814e-02-9.13553672e-06 1.42154300e-09-8.26043195e-14    2
-2.85211117e+04-9.14098376e+01 6.08693415e-01 8.12533376e-02-5.99544347e-05    3
 2.32306975e-08-3.71302106e-12-2.07306507e+04 3.04600742e+01                   4
c6h11o1-5  3/28/97 thermc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1397.000     41
 1.99304018e+01 2.50878998e-02-8.55881248e-06 1.32642733e-09-7.68596330e-14    2
-8.79248519e+03-7.55242129e+01-1.17611678e+00 7.67820021e-02-5.79189808e-05    3
 2.31283510e-08-3.81018248e-12-1.67830272e+03 3.70214234e+01                   4
c4h71-4    4/ 2/97 thermc   4h   7    0    0g   300.000  5000.000 1392.000     21
 1.09215027e+01 1.59294073e-02-5.43642246e-06 8.42695797e-10-4.88353299e-14    2
 1.90921144e+04-3.12721325e+01-4.09581101e-02 4.06024409e-02-2.67339769e-05    3
 9.28995844e-09-1.35368138e-12 2.30309664e+04 2.79985374e+01                   4
cjh2ooh    11/28/99       c   1h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1387.000     21
 9.11485569e+00 5.08455401e-03-1.77434554e-06 2.79202873e-10-1.63513161e-14    2
 3.77183263e+03-2.08715304e+01 4.59149302e+00 1.53929093e-02-1.08252672e-05    3
 3.94840151e-09-5.98062430e-13 5.38276049e+03 3.53753543e+00                   4
ch3ooh     11/28/99       c   1h   4o   2    0g   300.000  5000.000 1390.000     21
 8.43117091e+00 8.06817909e-03-2.77094921e-06 4.31332243e-10-2.50692146e-14    2
-1.96678771e+04-1.91170629e+01 3.23442817e+00 1.90129767e-02-1.13386287e-05    3
 3.40306653e-09-4.11830222e-13-1.77197926e+04 9.25623949e+00                   4
cocho      11/28/99       c   2h   1o   2    0g   300.000  5000.000 1399.000     11
 9.41097680e+00 2.85478756e-03-1.03981117e-06 1.68354991e-10-1.00574565e-14    2
-1.06556221e+04-2.20413200e+01 2.12687538e+00 2.12284274e-02-1.86092864e-05    3
 7.71550323e-09-1.23665007e-12-8.32273313e+03 1.64962525e+01                   4
mm1jm*o    11/28/99       c   2h   1o   3    0g   300.000  5000.000 1400.000     21
 1.13111696e+01 3.41167336e-03-1.24322295e-06 2.01350134e-10-1.20310784e-14    2
-3.66759553e+04-3.07533656e+01 2.78875605e+00 2.44800708e-02-2.08392263e-05    3
 8.32687865e-09-1.27754638e-12-3.39103033e+04 1.44765150e+01                   4
chooco     11/28/99       c   2h   1o   3    0g   300.000  5000.000 1400.000     21
 1.13111696e+01 3.41167336e-03-1.24322295e-06 2.01350134e-10-1.20310784e-14    2
```

```
-3.66759553e+04-3.07533656e+01 2.78875605e+00 2.44800708e-02-2.08392263e-05    3
 8.32687865e-09-1.27754638e-12-3.39103033e+04 1.44765150e+01                   4
chocho     11/28/99       c   2h   2o   2    0g   300.000  5000.000 1386.000     11
 9.75438561e+00 4.97645947e-03-1.74410483e-06 2.75586994e-10-1.61969892e-14    2
-2.95832896e+04-2.61878329e+01 1.88105120e+00 2.36386368e-02-1.83443295e-05    3
 6.84842963e-09-9.92733674e-13-2.69280190e+04 1.59154793e+01                   4
mmm*o      11/28/99       c   2h   2o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000     21
 1.20177429e+01 5.47634447e-03-1.98286044e-06 3.19786482e-10-1.90520238e-14    2
-6.06162543e+04-3.71779462e+01 1.69775988e+00 2.94327725e-02-2.26412169e-05    3
 8.14786234e-09-1.11393176e-12-5.70904174e+04 1.81800119e+01                   4
mm1oohm*o 11/28/99        c   2h   2o   5    0g   300.000  5000.000 1414.000     41
 1.82377988e+01 4.43615293e-03-1.62378040e-06 2.63759046e-10-1.57922565e-14    2
-7.75666653e+04-6.29454126e+01 3.51628845e+00 4.37714935e-02-4.16373612e-05    3
 1.85721086e-08-3.18173704e-12-7.30839724e+04 1.41389409e+01                   4
cjh2cho    11/28/99       c   2h   3o   1    0g   300.000  5000.000 1380.000     11
 7.59510378e+00 6.87889086e-03-2.41175399e-06 3.80699662e-10-2.23446830e-14    2
-1.88934155e+03-1.66958732e+01 1.65214366e+00 1.96356890e-02-1.26868049e-05    3
 4.10229425e-09-5.39149963e-13 3.09109769e+02 1.56586657e+01                   4
ch2cho     11/28/99       c   2h   3o   1    0g   300.000  5000.000 1380.000     11
 7.59510378e+00 6.87889086e-03-2.41175399e-06 3.80699662e-10-2.23446830e-14    2
-1.88934155e+03-1.66958732e+01 1.65214366e+00 1.96356890e-02-1.26868049e-05    3
 4.10229425e-09-5.39149963e-13 3.09109769e+02 1.56586657e+01                   4
mm1j       11/28/99       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1601.000     21
 9.73659803e+00 7.42432713e-03-2.65641779e-06 4.25031143e-10-2.51824924e-14    2
-2.35512450e+04-2.37360013e+01 4.16215406e+00 1.38037511e-02-3.08486109e-07    3
-4.56430814e-09 1.46909632e-12-2.09627030e+04 8.54235619e+00                   4
chohcho    11/28/99       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000     21
 9.85530662e+00 7.18379510e-03-2.54080470e-06 4.03448159e-10-2.37783842e-14    2
-2.17044669e+04-2.66953148e+01 1.34221970e+00 2.70351600e-02-2.02968053e-05    3
 7.67858383e-09-1.17848728e-12-1.87446067e+04 1.90390763e+01                   4
ch3oco     11/28/99       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1601.000     21
 9.73659803e+00 7.42432713e-03-2.65641779e-06 4.25031143e-10-2.51824924e-14    2
-2.35512450e+04-2.37360013e+01 4.16215406e+00 1.38037511e-02-3.08486109e-07    3
-4.56430814e-09 1.46909632e-12-2.09627030e+04 8.54235619e+00                   4
ch3oco     11/28/99       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1601.000     21
 9.73659803e+00 7.42432713e-03-2.65641779e-06 4.25031143e-10-2.51824924e-14    2
-2.35512450e+04-2.37360013e+01 4.16215406e+00 1.38037511e-02-3.08486109e-07    3
-4.56430814e-09 1.46909632e-12-2.09627030e+04 8.54235619e+00                   4
ch2ocho    11/28/99       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 2018.000     21
 8.44397265e+00 8.81405857e-03-3.23029618e-06 5.26923491e-10-3.16806839e-14    2
-2.17663179e+04-1.50534594e+01 3.22498899e+00 1.90239604e-02-9.55384264e-06    3
 1.70721984e-09 8.54934709e-15-1.98639523e+04 1.35344729e+01                   4
mmmo       11/28/99       c   2h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1475.000     21
 1.20233916e+01 8.11262659e-03-2.91356462e-06 4.67340384e-10-2.77375525e-14    2
-4.56646728e+04-3.40234335e+01 5.19690837e+00 1.58839723e-02 3.53540547e-07    3
-6.10456923e-09 1.94661801e-12-4.25242289e+04 5.46220563e+00                   4
mm1o       11/28/99       c   2h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1369.000     21
 1.25424537e+01 7.62116954e-03-2.73211983e-06 4.37719551e-10-2.59584712e-14    2
-5.06831250e+04-4.12652926e+01 2.83912633e+00 2.82845016e-02-1.86859928e-05    3
 5.65887946e-09-6.18353637e-13-4.71331387e+04 1.15273446e+01                   4
mmmoox     11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000     31
 1.40904750e+01 8.33449873e-03-2.95553314e-06 4.70107854e-10-2.77398148e-14    2
-4.43977091e+04-4.03050587e+01 4.19572167e+00 3.13491704e-02-2.35461348e-05    3
 8.94146568e-09-1.38341937e-12-4.09435015e+04 1.28865989e+01                   4
mmmoo      11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000     31
 1.40904750e+01 8.33449873e-03-2.95553314e-06 4.70107854e-10-2.77398148e-14    2
-4.43977091e+04-4.03050587e+01 4.19572167e+00 3.13491704e-02-2.35461348e-05    3
 8.94146568e-09-1.38341937e-12-4.09435015e+04 1.28865989e+01                   4
mm1oox     11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 2016.000     31
 1.25854758e+01 1.02930211e-02-3.82403103e-06 6.29291954e-10-3.80631693e-14    2
-4.54377849e+04-3.20448502e+01 7.22446770e+00 1.92019493e-02-7.25127393e-06    3
-9.00248547e-11 3.99255841e-13-4.33158082e+04-2.09078074e+00                   4
mm1oo      11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 2016.000     31
 1.25854758e+01 1.02930211e-02-3.82403103e-06 6.29291954e-10-3.80631693e-14    2
-4.54377849e+04-3.20448502e+01 7.22446770e+00 1.92019493e-02-7.25127393e-06    3
-9.00248547e-11 3.99255841e-13-4.33158082e+04-2.09078074e+00                   4
mm1oohmj   11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 1410.000     21
 1.53946764e+01 7.37811095e-03-2.56491784e-06 4.02795764e-10-2.35634210e-14    2
-3.92736367e+04-4.62052031e+01 5.03567155e+00 3.24053471e-02-2.52933867e-05    3
 9.59212722e-09-1.41574821e-12-3.58366749e+04 9.00543772e+00                   4
mmmooh1j   11/28/99       c   2h   3o   4    0g   300.000  5000.000 1385.000     41
 1.61845546e+01 6.23331182e-03-2.25564848e-06 3.63643658e-10-2.16592954e-14    2
-3.88152635e+04-5.10673918e+01 3.84885232e+00 3.61375218e-02-2.97460799e-05    3
 1.17472501e-08-1.81316523e-12-3.47125848e+04 1.46783463e+01                   4
mm1oohmoox 12/2/99        c   2h   3o   6    0g   300.000  5000.000 1388.000     51
 2.10167516e+01 6.86233698e-03-2.48741480e-06 4.01449242e-10-2.39293059e-14    2
-6.17738806e+04-7.11484656e+01 5.84230047e+00 4.53704530e-02-4.00057985e-05    3
 1.70310687e-08-2.84277765e-12-5.68897637e+04 9.13204355e+00                   4
```

```
mm1oohmoo 11/28/99        c   2h   3o   6    0g   300.000  5000.000 1388.000     51
 2.10167516e+01 6.86233698e-03-2.48741480e-06 4.01449242e-10-2.39293059e-14    2
-6.17738806e+04-7.11484656e+01 5.84230047e+00 4.53704530e-02-4.00057985e-05    3
 1.70310687e-08-2.84277765e-12-5.68897637e+04 9.13204355e+00                   4
mmmooh1oox 12/2/99        c   2h   3o   6    0g   300.000  5000.000 1388.000     51
 2.10167516e+01 6.86233698e-03-2.48741480e-06 4.01449242e-10-2.39293059e-14    2
-6.17738806e+04-7.11484656e+01 5.84230047e+00 4.53704530e-02-4.00057985e-05    3
 1.70310687e-08-2.84277765e-12-5.68897637e+04 9.13204355e+00                   4
mmmooh1oo 11/28/99        c   2h   3o   6    0g   300.000  5000.000 1388.000     51
 2.10167516e+01 6.86233698e-03-2.48741480e-06 4.01449242e-10-2.39293059e-14    2
-6.17738806e+04-7.11484656e+01 5.84230047e+00 4.53704530e-02-4.00057985e-05    3
 1.70310687e-08-2.84277765e-12-5.68897637e+04 9.13204355e+00                   4
mmm1oohmj 11/28/99        c   2h   3o   6    0g   300.000  5000.000 1402.000     61
 2.17587535e+01 5.77447221e-03-2.10473545e-06 3.40933743e-10-2.03737719e-14    2
-5.68254708e+04-7.25200882e+01 6.58001082e+00 4.41749842e-02-3.88960697e-05    3
 1.61561562e-08-2.58918106e-12-5.19817326e+04 7.73439394e+00                   4
ch3cho     11/28/99       c   2h   4o   1    0g   300.000  5000.000 1366.000     11
 7.06734034e+00 9.72785577e-03-3.36197228e-06 5.25639518e-10-3.06473991e-14    2
-2.32754287e+04-1.33686458e+01 1.98023941e+00 1.69300955e-02-4.36472545e-06    3
-1.70119601e-09 7.72360943e-13-2.10195065e+04 1.56487028e+01                   4
ch3och*o  11/28/99        c   2h   4o   2    0g   300.000  5000.000 1686.000     21
 8.69123518e+00 1.15503122e-02-4.27782486e-06 7.02533059e-10-4.24333552e-14    2
-4.64364769e+04-1.89301478e+01 3.08839783e+00 2.03760048e-02-6.84777040e-06    3
-7.28186203e-10 5.62130216e-13-4.41855167e+04 1.25364719e+01                   4
mm         11/28/99       c   2h   4o   2    0g   300.000  5000.000 1686.000     21
 8.69123518e+00 1.15503122e-02-4.27782486e-06 7.02533059e-10-4.24333552e-14    2
-4.64364769e+04-1.89301478e+01 3.08839783e+00 2.03760048e-02-6.84777040e-06    3
-7.28186203e-10 5.62130216e-13-4.41855167e+04 1.25364719e+01                   4
ch2ohcho  11/28/99        c   2h   4o   2    0g   300.000  5000.000 1358.000     21
 8.87306567e+00 9.92257253e-03-3.34820779e-06 5.15546009e-10-2.97527820e-14    2
-4.09027869e+04-1.82786314e+01 4.37688685e+00 1.59485358e-02-3.63672718e-06    3
-1.79212805e-09 7.41898956e-13-3.88632603e+04 7.50888268e+00                   4
ch3ocho    11/28/99       c   2h   4o   2    0g   300.000  5000.000 1686.000     21
 8.69123518e+00 1.15503122e-02-4.27782486e-06 7.02533059e-10-4.24333552e-14    2
-4.64364769e+04-1.89301478e+01 3.08839783e+00 2.03760048e-02-6.84777040e-06    3
-7.28186203e-10 5.62130216e-13-4.41855167e+04 1.25364719e+01                   4
mmmoh      11/28/99       c   2h   4o   3    0g   300.000  5000.000 1673.000     31
 1.02200495e+01 1.23957040e-02-4.57570506e-06 7.49813285e-10-4.52208864e-14    2
-6.91785368e+04-2.32884038e+01 5.05433721e+00 1.91802746e-02-4.17205894e-06    3
-2.40318071e-09 9.05697090e-13-6.69785641e+04 6.19700649e+00                   4
mm1oh      11/28/99       c   2h   4o   3    0g   300.000  5000.000 1371.000     31
 1.26391477e+01 9.70490594e-03-3.46053136e-06 5.52439498e-10-3.26800648e-14    2
-7.71269290e+04-4.20189258e+01 2.05396450e+00 3.20839169e-02-2.08608292e-05    3
 6.45350667e-09-7.67770261e-13-7.32001750e+04 1.56927998e+01                   4
mmmooh     11/28/99       c   2h   4o   4    0g   300.000  5000.000 1387.000     41
 1.64584298e+01 8.52683511e-03-3.04113500e-06 4.85596908e-10-2.87316334e-14    2
-6.23959608e+04-5.38924139e+01 3.47935703e+00 4.02952392e-02-3.30109296e-05    3
 1.34360117e-08-2.18601580e-12-5.80629934e+04 1.52521392e+01                   4
mm1ooh     11/28/99       c   2h   4o   4    0g   300.000  5000.000 1670.000     41
 1.47281473e+01 1.07942748e-02-4.04930123e-06 6.70661159e-10-4.07472413e-14    2
-6.34016480e+04-4.45052531e+01 6.51898646e+00 2.65151602e-02-1.32347391e-05    3
 1.97939773e-09 1.49145093e-13-6.03921951e+04 5.65186667e-01                   4
mmm1ooh    11/28/99       c   2h   4o   6    0g   300.000  5000.000 1403.000     61
 2.41543361e+01 6.35059210e-03-2.31857677e-06 3.75985026e-10-2.24854953e-14    2
-7.99776367e+04-8.89850098e+01 3.80917468e+00 6.21182096e-02-6.10160297e-05    3
 2.83200305e-08-5.06256695e-12-7.38741788e+04 1.71298156e+01                   4
ch3cjhoh  11/28/99        c   2h   5o   1    0g   300.000  5000.000 1392.000     21
 7.83524517e+00 1.08808198e-02-3.68694127e-06 5.68601361e-10-3.28288951e-14    2
-1.07534311e+04-1.53495702e+01 1.91496477e+00 2.45693145e-02-1.63075399e-05    3
 6.12282361e-09-1.00784363e-12-8.62161551e+03 1.65987309e+01                   4
inter91j  11/28/99        c   2h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000     41
 1.27264336e+01 1.11614045e-02-3.82692596e-06 5.95076748e-10-3.45615999e-14    2
-2.17571636e+04-3.23103386e+01 5.41864204e+00 2.63925608e-02-1.54514521e-05    3
 4.42606448e-09-4.87838210e-13-1.90119216e+04 7.62864345e+00                   4
ch3ch2oh  11/28/99        c   2h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1391.000     21
 7.95264841e+00 1.31574144e-02-4.43693359e-06 6.82201160e-10-3.93096335e-14    2
-3.22546088e+04-1.76537972e+01 4.23149045e-01 2.92858167e-02-1.73845099e-05    3
 5.33639892e-09-6.74917252e-13-2.94626185e+04 2.33538763e+01                   4
inter9     11/28/99       c   2h   6o   3    0g   300.000  5000.000 1394.000     41
 1.32129341e+01 1.32510859e-02-4.53836008e-06 7.05195227e-10-4.09372948e-14    2
-4.43655608e+04-3.82062492e+01 3.12614908e+00 3.61787767e-02-2.44163913e-05    3
 8.55589805e-09-1.23616347e-12-4.07855935e+04 1.62135426e+01                   4
me2*omj*o 11/28/99        c   3h   1o   4    0g   300.000  5000.000 1423.000     31
 1.59320710e+01 4.25192352e-03-1.55560303e-06 2.52604948e-10-1.51211083e-14    2
-4.98279048e+04-5.16425040e+01 2.97334778e+00 3.75629799e-02-3.38759673e-05    3
 1.42632985e-08-2.29979140e-12-4.57665074e+04 1.66510171e+01                   4
me2j*om*o 11/28/99        c   3h   1o   4    0g   300.000  5000.000 1423.000     31
 1.59320710e+01 4.25192352e-03-1.55560303e-06 2.52604948e-10-1.51211083e-14    2
```

```
-5.45586547e+04-5.15015880e+01 2.97334778e+00 3.75629799e-02-3.38759673e-05    3
 1.42632985e-08-2.29979140e-12-5.04972573e+04 1.67919330e+01                   4
me2*om*o  11/28/99        c   3h   2o   4    0g   300.000  5000.000 1386.000     31
 1.63441553e+01 6.58274279e-03-2.39074076e-06 3.86344168e-10-2.30494653e-14    2
-7.36784815e+04-5.57205310e+01 2.37581057e+00 3.98611872e-02-3.20272936e-05    3
 1.20739004e-08-1.74163204e-12-6.90042291e+04 1.88836570e+01                   4
ch3coco    11/28/99       c   3h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1369.000     21
 1.13925066e+01 8.52818486e-03-3.02850092e-06 4.82179185e-10-2.84715510e-14    2
-1.90281027e+04-3.12840658e+01 2.70418537e+00 2.55934009e-02-1.43063919e-05    3
 3.06844224e-09-7.76977970e-14-1.57036518e+04 1.64989198e+01                   4
me2jm*o    11/28/99       c   3h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000     31
 1.56231440e+01 7.14066590e-03-2.56985119e-06 4.12807929e-10-2.45265971e-14    2
-4.73332688e+04-5.65798729e+01 2.17226171e+00 4.06625227e-02-3.46374699e-05    3
 1.43839482e-08-2.35702951e-12-4.29311817e+04 1.48182596e+01                   4
c3h3o3     11/28/99       c   3h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1666.000     31
 1.31176318e+01 1.00195794e-02-3.77691326e-06 6.27548335e-10-3.82123974e-14    2
-4.07550994e+04-3.72776955e+01 3.52662076e+00 3.01375260e-02-1.79730307e-05    3
 4.37410569e-09-2.78066542e-13-3.74143315e+04 1.47418718e+01                   4
me2j*o     11/28/99       c   3h   3o   3    0g   300.000  5000.000 1666.000     31
 1.31176318e+01 1.00195794e-02-3.77691326e-06 6.27548335e-10-3.82123974e-14    2
-4.07550994e+04-3.72776955e+01 3.52662076e+00 3.01375260e-02-1.79730307e-05    3
 4.37410569e-09-2.78066542e-13-3.74143315e+04 1.47418718e+01                   4
ch3cocho  11/28/99        c   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+04-3.53976752e+01 1.97192949e+00 3.01085469e-02-1.67791836e-05    3
 3.73805387e-09-1.49790837e-13-3.42361657e+04 1.88652981e+01                   4
mem*o      11/28/99       c   3h   4o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000     31
 1.42828317e+01 1.06801402e-02-3.75657327e-06 5.94347523e-10-3.49431282e-14    2
-6.84188580e+04-4.98138753e+01 2.27884400e+00 3.78670975e-02-2.69084418e-05    3
 9.41885910e-09-1.30787164e-12-6.41860544e+04 1.49238921e+01                   4
me2*o      11/28/99       c   3h   4o   3    0g   300.000  5000.000 2036.000     31
 1.32342841e+01 1.26547753e-02-4.73598618e-06 7.83181029e-10-4.75331455e-14    2
-5.95970849e+04-3.95014226e+01 2.97564841e+00 3.39801893e-02-1.96979934e-05    3
 4.74764207e-09-3.15088446e-13-5.59770438e+04 1.62451782e+01                   4
me2j       11/28/99       c   3h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1376.000     31
 1.34749717e+01 1.14688572e-02-4.05151839e-06 6.42781967e-10-3.78606108e-14    2
-3.16810801e+04-4.61602203e+01 2.69086507e+00 3.38248090e-02-2.08509956e-05    3
 6.00451093e-09-6.34484103e-13-2.76337923e+04 1.27963293e+01                   4
pald3oh3j 11/28/99        c   3h   5o   2    0g   300.000  5000.000 1380.000     31
 1.21608809e+01 1.16959275e-02-3.93838521e-06 6.05562324e-10-3.49130908e-14    2
-2.45192519e+04-3.26933115e+01 4.12505684e+00 2.98745316e-02-2.00100761e-05    3
 7.29394429e-09-1.14364486e-12-2.16147308e+04 1.07674782e+01                   4
pald3oohj 11/28/99        c   3h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1374.000     41
 1.50673178e+01 1.19054290e-02-4.12657485e-06 6.46505499e-10-3.77500872e-14    2
-1.69392694e+04-4.34873413e+01 7.01364639e+00 2.72505822e-02-1.40933275e-05    3
 3.01377981e-09-1.37365901e-13-1.37523951e+04 1.06997040e+00                   4
me2oh2j    11/28/99       c   3h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1378.000     41
 1.57783882e+01 1.17540064e-02-4.17779133e-06 6.65539978e-10-3.93135064e-14    2
-5.37366660e+04-5.75443881e+01 2.29078932e+00 4.16666867e-02-2.91211273e-05    3
 1.00056227e-08-1.37254200e-12-4.88896479e+04 1.54670053e+01                   4
me2ooh2j   11/28/99       c   3h   5o   4    0g   300.000  5000.000 1387.000     51
 1.90088268e+01 1.10165441e-02-3.89632720e-06 6.18692799e-10-3.64649942e-14    2
-4.31732088e+04-6.65570491e+01 5.01961653e+00 4.43427200e-02-3.43886406e-05    3
 1.33827528e-08-2.09871141e-12-3.83979860e+04 8.31553672e+00                   4
me         11/28/99       c   3h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1370.000     31
 1.29231554e+01 1.44439302e-02-5.06803207e-06 8.00397109e-10-4.69940408e-14    2
-5.52894867e+04-4.38652153e+01 2.91389503e+00 3.17138713e-02-1.35286837e-05    3
 9.23161447e-10 4.96186804e-13-5.11644162e+04 1.21238112e+01                   4
me2oh      11/28/99       c   3h   6o   2    0g   300.000  5000.000 1462.000     41
 1.80075923e+01 1.00435107e-02-3.63203211e-06 5.85268400e-10-3.48482381e-14    2
-7.41958586e+04-6.72613978e+01 4.62450803e+00 3.36093974e-02-1.43103864e-05    3
-6.81963530e-10 1.21588921e-12-6.89155305e+04 7.11896472e+00                   4
eaoj       07/09/09       c   2h   3o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.81129723E+01 0.73693236E-02-0.17632809E-05 0.21898536E-09-0.11404446E-13    2
-0.28718352E+05-0.16925972E+02 0.69534266E+00 0.25714220E-01-0.16327969E-04    3
 0.35145076E-08 0.32753601E-12-0.26509943E+05 0.22067402E+02                   4
memoo      07/09/09       c   3h   5o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.76473498E+01 0.23754019E-01-0.79106148E-05 0.12443437E-08-0.75968000E-13    2
-0.48271039E+05-0.27693253E+01-0.32451377E+01 0.68734549E-01-0.61893028E-04    3
 0.22529457E-07-0.14785924E-11-0.46915434E+05 0.47739613E+02                   4
memo       07/09/09       c   3h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.54393549E+01 0.23333151E-01-0.78278063E-05 0.12380472E-08-0.75884543E-13    2
-0.47491570E+05 0.56731834E+01-0.45924325E+01 0.64353503E-01-0.57289828E-04    3
 0.21274250E-07-0.16505815E-11-0.46176730E+05 0.52395916E+02                   4
me2oohmj   07/09/09       c   3h   5o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.25671601E+01 0.32531746E-01-0.12141311E-04 0.20693913E-08-0.13357094E-12    2
-0.35260570E+05 0.30362762E+02 0.12443651E+01 0.63341491E-01-0.71548871E-04    3
 0.40055738E-07-0.82150719E-11-0.37420414E+05 0.27752602E+02                   4
```

```
memooh2j   07/09/09    c   3h   5o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.58645654E01 0.29849401E-01-0.11256519E-04 0.19323116E-08-0.12532915E-12    2
-0.42131234E+05 0.85487289E+01-0.20110438E+01 0.65504722E-01-0.52727806E-04    3
 0.14428279E-07 0.10420629E-11-0.41616992E-05 0.43574657E+02                   4
memooh    07/09/09    c   3h   6o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.58645654E01 0.29849401E-01-0.11256519E-04 0.19323116E-08-0.12532915E-12    2
-0.65386555E+05 0.85487289E+01-0.20110438E+01 0.65504722E-01-0.52727806E-04    3
 0.14428279E-07 0.10420629E-11-0.64872312E+05 0.43574657E+02                   4
mecy2om   07/09/09    c   3h   4o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.58645654E01 0.29849401E-01-0.11256519E-04 0.19323116E-08-0.12532915E-12    2
-0.65386555E+05 0.85487289E+01-0.20110438E+01 0.65504722E-01-0.52727806E-04    3
 0.14428279E-07 0.10420629E-11-0.64872312E+05 0.43574657E+02                   4
me2oohmoo  07/09/09    c   3h   5o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.56547518E01 0.34086395E-01-0.12408633E-04 0.20785940E-08-0.13256863E-12    2
-0.56489000E+05 0.18483849E+02-0.71876019E+00 0.77607773E-01-0.73204727E-04    3
 0.26820496E-07-0.12506335E-11-0.57572676E+05 0.41419399E+02                   4
memooh2oo  07/09/09    c   3h   5o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.56686492E01 0.30737298E-01-0.11030719E-04 0.18289634E-08-0.11580155E-12    2
-0.65683859E+05 0.54579163E+01-0.58381909E+00 0.67760088E-01-0.58071786E-04    3
 0.16822160E-07 0.11380506E-11-0.66261492E+05 0.29834984E02                    4
memooh2*o  07/09/09    c   3h   4o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.56686492E01 0.30737298E-01-0.11030719E-04 0.18289634E-08-0.11580155E-12    2
-0.65683859E+05 0.54579163E+01-0.58381909E+00 0.67760088E-01-0.58071786E-04    3
 0.16822160E-07 0.11380506E-11-0.66261492E+05 0.29834984E02                    4
me2oohm*o  07/09/09    c   3h   4o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.11326867E02 0.20606823E-01-0.74711079E-05 0.12468003E-08-0.79250686E-13    2
-0.73867531E+05-0.17377686E+02 0.57190790E+01 0.40011056E-01-0.27302394E-04    3
 0.66660122E-08 0.51916772E-12-0.72825914E+05 0.99149494E01                    4
eaoj2*o    07/09/09    c   2h   1o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.30659377E+05 0.30657398E02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.30659377E+05 0.30657398E02                    4
pald3oh   11/28/99    c   3h   6o   2    0g   300.000   5000.000 1377.000    31
 1.22894577e+01 1.39823973e-02-4.69687007e-06 7.21074719e-10-4.15305994e-14    2
-4.60301015e+04-3.50722245e+01 2.71184298e+00 3.42800624e-02-2.06440401e-05    3
 6.25584618e-09-7.60656252e-13-4.24687874e+04 1.71499324e+01                   4
pald3ooh  11/28/99    c   3h   6o   3    0g   300.000   5000.000 1381.000    41
 1.55489393e+01 1.40024914e-02-4.84114037e-06 7.57163595e-10-4.41589462e-14    2
-3.95456005e+04-4.93558904e+01 4.70097804e+00 3.71281586e-02-2.31990728e-05    3
 7.23333924e-09-9.05813028e-13-3.55230362e+04 9.74808709e+00                   4
me2ooh    11/28/99    c   3h   6o   4    0g   300.000   5000.000 1391.000    51
 1.97110088e+01 1.29776669e-02-4.57540371e-06 7.25016229e-10-4.26707647e-14    2
-6.58740765e+04-7.37116443e+01 2.64523693e+00 5.47688049e-02-4.40935755e-05    3
 1.78655012e-08-2.91035225e-12-6.01698133e+04 1.72061136e+01                   4
propol1j  11/28/99    c   3h   7o   1    0g   300.000   5000.000 1393.000    31
 1.10500439e+01 1.52562747e-02-5.17257413e-06 7.98146428e-10-4.61030406e-14    2
-1.48919342e+04-3.11722496e+01 1.49130595e+00 3.76502110e-02-2.58507542e-05    3
 9.78662277e-09-1.58835656e-12-1.15157153e+04 2.02462575e+01                   4
inter71j  11/28/99    c   3h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1394.000    61
 1.99819368e+01 1.45295932e-02-5.03255311e-06 7.88004238e-10-4.59925541e-14    2
-2.17611371e+04-6.80886117e+01 6.47607637e+00 4.55438800e-02-3.20435338e-05    3
 1.14158066e-08-1.64254714e-12-1.70304950e+04 4.61411179e+00                   4
propanol  11/28/99    c   3h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1392.000    31
 1.10907535e+01 1.76742297e-02-5.98706942e-06 9.23367083e-10-5.33205539e-14    2
-3.63712222e+04-3.30601068e+01 2.11500059e+01 4.14485973e-02-2.56417853e-05    3
 8.28216750e-09-1.11303720e-12-3.23891311e+04 2.60160990e+01                   4
nc3h7oh   11/28/99    c   3h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1392.000    31
 1.10907535e+01 1.76742297e-02-5.98706942e-06 9.23367083e-10-5.33205539e-14    2
-3.63712222e+04-3.30601068e+01 2.11500059e+01 4.14485973e-02-2.56417853e-05    3
 8.28216750e-09-1.11303720e-12-3.23891311e+04 2.60160990e+01                   4
inter7    11/28/99    c   3h   8o   4    0g   300.000   5000.000 1397.000    61
 2.04632096e+01 1.66295181e-02-5.74873895e-06 8.98986222e-10-5.24232997e-14    2
-4.43691706e+04-7.39587725e+01 4.17333537e+00 5.53632962e-02-4.10556541e-05    3
 1.55781177e-08-2.39891282e-12-3.88022306e+04 1.32493274e+01                   4
cjhchchco 11/28/99    c   4h   3o   1    0g   300.000   5000.000 1402.000    11
 1.34486832e+01 6.80709677e-03-2.34271024e-06 3.65242712e-10-2.12532152e-14    2
 2.53504715e+04-4.38578127e+01 6.64782318e-01 4.72293419e-02-5.15535776e-05    3
 2.71181935e-08-5.42654263e-12 2.87663279e+04 2.11083886e+01                   4
mp2*omj*o 11/28/99    c   4h   3o   4    0g   300.000   5000.000 1680.000    41
 1.56402989e+01 1.28101938e-02-4.80948267e-06 7.97000777e-10-4.84847157e-14    2
-5.71167109e+04-4.77731374e+01 4.90663630e+00 3.47395847e-02-1.96251427e-05    3
 4.35757123e-09-1.95937962e-13-5.33101537e+04 1.06735160e+01                   4
ch2chchco 11/28/99    c   4h   4o   1    0g   300.000   5000.000 1401.000    11
 1.32918890e+01 9.42783712e-03-3.23329764e-06 5.02853718e-10-2.92089737e-14    2
-4.65486164e+03-4.48053204e+01-1.74329010e-01 4.99882693e-02-5.08353583e-05    3
 2.57383902e-08-5.04416081e-12-8.53247629e+02 2.43466973e+01                   4
mp2*om*o  11/28/99    c   4h   4o   4    0g   300.000   5000.000 1368.000    41
 1.86227626e+01 1.20767518e-02-4.33452197e-06 6.94991844e-10-4.12383909e-14    2
-8.21784314e+04-6.66972624e+01 2.76326345e+00 4.56905075e-02-2.99282421e-05    3
 8.80210887e-09-8.92878529e-13-7.63767280e+04 1.96178749e+01                   4
mp2dsj    11/28/99    c   4h   5o   2    0g   300.000   5000.000 1382.000    31
 1.53064907e+01 1.24451497e-02-4.38435064e-06 6.94295160e-10-4.08413507e-14    2
-1.41920449e+04-5.07919771e+01 2.82736838e+00 4.14386274e-02-3.06645745e-05    3
 1.18264941e-08-1.89960806e-12-9.78914504e+03 1.63763384e+01                   4
baoj2d    11/28/99    c   4h   5o   2    0g   300.000   5000.000 1394.000    21
 1.37091543e+01 1.38206640e-02-4.76650428e-06 7.44131070e-10-4.33397407e-14    2
-2.42212811e+04-4.38303913e+01 6.63901890e-01 4.68991280e-02-3.78972456e-05    3
 1.62048051e-08-2.84144823e-12-1.99098792e+04 2.53766096e+01                   4
c2h5coco  11/28/99    c   4h   5o   2    0g   300.000   5000.000 1374.000    31
 1.47626532e+01 1.25543084e-02-4.35010357e-06 6.81929197e-10-3.98515398e-14    2
-2.32655342e+04-4.76026487e+01 2.77995797e+00 3.85758339e-02-2.54609333e-05    3
 8.32264897e-09-1.08802779e-12-1.88920316e+04 1.74792501e+01                   4
c4h5o2    11/28/99    c   4h   5o   2    0g   300.000   5000.000 1397.000    31
 1.51555849e+01 1.32710506e-02-4.25639880e-06 6.67172506e-10-3.89703597e-14    2
-2.17437639e+04-4.92780280e+01 1.63495441e+00 4.53005544e-02-3.53599660e-05    3
 1.40742659e-08-2.26346420e-12-1.72177875e+04 2.27820835e+01                   4
baoj2*o   11/28/99    c   4h   5o   3    0g   300.000   5000.000 1378.000    31
 1.56946958e+01 1.47928736e-02-5.22425330e-06 8.28641300e-10-4.87986868e-14    2
-4.76287855e+04-5.14018730e+01 2.00009752e+00 4.48577201e-02-3.05675641e-05    3
 1.07314872e-08-1.58048023e-12-4.26022140e+04 2.29639003e+01                   4
mp3j2*o   11/28/99    c   4h   5o   3    0g   300.000   5000.000 1674.000    41
 1.60502569e+01 1.52384273e-02-5.70811867e-06 9.44490933e-10-5.73459761e-14    2
-4.64698351e+04-5.22156991e+01 4.96745222e+00 3.62480066e-02-1.77176819e-05    3
 2.48155628e-09 2.42724279e-13-4.23820090e+04 8.71610358e+00                   4
mp3joh2*o 11/28/99    c   4h   5o   4    0g   300.000   5000.000 1666.000    51
 1.74759455e+01 1.63345785e-02-6.13596050e-06 1.01717226e-09-6.18385876e-14    2
-6.60605128e+04-5.88885231e+01 4.33356380e+00 4.19875155e-02-2.17603227e-05    3
 3.67960952e-09 1.28068434e-13-6.12924206e+04 1.31059145e+01                   4
mp2d      11/28/99    c   4h   6o   2    0g   300.000   5000.000 1382.000    31
 1.53838778e+01 1.49244222e-02-5.23903493e-06 8.27660248e-10-4.86053247e-14    2
-4.42947912e+04-5.31029638e+01 2.05265608e+00 4.42654500e-02-2.98476063e-05    3
 1.02829815e-08-1.46723207e-12-3.94315114e+04 1.92244429e+01                   4
ba2d      11/28/99    c   4h   6o   2    0g   300.000   5000.000 1392.000    31
 1.46850421e+01 1.52168917e-02-5.27120055e-06 8.25357806e-10-4.81697516e-14    2
-5.09042842e+04-5.06212771e+01 2.06511914e-01 5.15514361e-02-4.13340835e-05    3
 1.75480119e-08-3.06481027e-12-4.60722523e+04 2.63392941e+01                   4
c2h5cocho 11/28/99    c   4h   6o   2    0g   300.000   5000.000 1375.000    31
 1.52573151e+01 1.45454619e-02-5.00894631e-06 7.82023934e-10-4.55738238e-14    2
-4.22541277e+04-5.19380704e+01 1.99597526e+00 4.33919821e-02-2.84745124e-05    3
 9.30788869e-09-1.22110565e-12-3.74183189e+04 2.00719715e+01                   4
ba2*o     11/28/99    c   4h   6o   3    0g   300.000   5000.000 1377.000    41
 1.66985429e+01 1.61281110e-02-5.69994552e-06 9.04532996e-10-5.32860634e-14    2
-7.43175138e+04-5.83389451e+01 1.50939239e+00 4.96283686e-02-3.41252605e-05    3
 1.21039573e-08-1.80118694e-12-6.87589053e+04 2.40862259e+01                   4
mp2*o     11/28/99    c   4h   6o   3    0g   300.000   5000.000 2021.000    41
 1.47014654e+01 1.91324837e-02-7.10622685e-06 1.16926651e-09-7.07190057e-14    2
-6.76572655e+04-4.57224716e+01 3.05791046e+00 4.08245981e-02-1.91405508e-05    3
 2.51837622e-09 2.78176317e-13-6.32919872e+04 1.84703831e+01                   4
mp3oh2*o  11/28/99    c   4h   6o   4    0g   300.000   5000.000 2016.000    51
 1.60333175e+01 2.01243791e-02-7.44871546e-06 1.22276820e-09-7.38342935e-14    2
-8.51591567e+04-4.80823213e+01 6.10029553e+00 3.65378908e-02-1.36181012e-05    3
 -2.21802479e-10 7.58778575e-13-8.12187286e+04 7.45117000e+00                  4
c3h7cjo   11/28/99    c   4h   7o   1    0g   300.000   5000.000 1380.000    31
 1.30026331e+01 1.63104877e-02-5.57642899e-06 8.65670629e-10-5.02255667e-14    2
-1.25875675e+04-4.02608515e+01 2.67256826e+00 3.71198825e-02-2.06862859e-05    3
 5.48873888e-09-5.35864183e-13-8.61573787e+03 1.64848950e+01                   4
sc3h5och2 11/28/99    c   4h   7o   1    0g   300.000   5000.000 1400.000    31
 1.48224846e+01 1.49228169e-02-5.13057768e-06 7.99332256e-10-4.64896664e-14    2
-1.52806638e+03-5.09910999e+01-8.92680497e-01 5.56225555e-02-4.63759702e-05    3
 2.00688696e-08-3.50836413e-12 3.53050133e+03 3.19935629e+01                   4
mp3j      11/28/99    c   4h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1376.000    41
 1.54260382e+01 1.69789201e-02-5.93961909e-06 9.36106835e-10-5.48809672e-14    2
-3.43012110e+04-5.25677530e+01 4.06577480e+00 3.88324925e-02-2.08048750e-05    3
 5.06251249e-09-4.21741752e-13-2.97848227e+04 1.02796868e+01                   4
baoj      11/28/99    c   4h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1386.000    41
 1.53279725e+01 1.66538913e-02-5.73762912e-06 8.95256120e-10-5.21264271e-14    2
-3.82577586e+04-5.45165563e+01 1.29970049e+00 4.96684730e-02-3.61143752e-05    3
 1.39497293e-08-2.25633276e-12-3.33543843e+04 2.08327003e+01                   4
mp3oh3j   11/28/99    c   4h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1381.000    51
 1.74931732e+01 1.72701468e-02-6.02220065e-06 9.47058349e-10-5.54377604e-14    2
-5.63626218e+04-6.03047135e+01 5.23571046e+00 4.40100176e-02-2.88586718e-05    3
 1.02218399e-08-1.58007002e-12-5.17869083e+04 6.41606184e+00                   4
mp2oh3j   11/28/99    c   4h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1388.000    51
 1.83405295e+01 1.65918991e-02-5.79907810e-06 9.13494504e-10-5.35389065e-14    2
-5.47645612e+04-6.47559405e+01 1.99093068e+00 5.54839544e-02-4.18825240e-05    3
 1.64839204e-08-2.68106873e-12-4.91125091e+04 2.28789334e+01                   4
mp3ooh3j  11/28/99    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1373.000    61
 2.08417363e+01 1.67773986e-02-5.90548591e-06 9.34611120e-10-5.49535791e-14    2
-4.89434225e+04-7.35586963e+01 8.31453391e+00 4.03454665e-02-2.08324478e-05    3
 4.25313450e-09-1.34190269e-13-4.39505471e+04-4.13477678e+00                   4
mp2oh3oo  11/28/99    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1388.000    61
 2.16636969e+01 1.84122553e-02-6.42028095e-06 1.00972593e-09-5.91114171e-14    2
-7.38463814e+04-7.66482717e+01 5.07748961e+00 5.71628740e-02-4.16965194e-05    3
 1.59704839e-08-2.54972796e-12-6.80245370e+04 1.25337496e+01                   4
sc3h5och3 11/28/99    c   4h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1388.000    31
 1.50719142e+01 1.75498740e-02-6.10184386e-06 9.57771418e-10-5.59932014e-14    2
-2.40700831e+04-5.49053957e+01-2.44620069e-01 5.37749314e-02-3.97211855e-05    3
 1.55707174e-08-2.55371420e-12-1.87245612e+04 2.73158059e+01                   4
mp        11/28/99    c   4h   8o   2    0g   300.000   5000.000 1377.000    41
 1.58888350e+01 1.91016386e-02-6.66470559e-06 1.04854359e-09-6.13977166e-14    2
-5.93845765e+04-5.79316966e+01 3.28288706e+00 4.35402729e-02-2.34892105e-05    3
 5.81218880e-09-5.01584468e-13-5.43986706e+04 1.17282975e+01                   4
mp2j      07/09/09    c   4h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.76460395E01 0.52607752E-01-0.21944566E-04 0.40440860E-08-0.27579222E-12    2
-0.29057402E+05 0.78219742E+02-0.72333246E+00 0.61797075E-01-0.54483895E-04    3
 0.21887010E-07-0.17510949E-11-0.33894000E+05 0.31900900E+02                   4
paoj      07/09/09    c   3h   5o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.76761365E01 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 0.29145782E02                    4
c2h4co    07/09/09    c   3h   4o   1    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.63257427E01 0.65247067E-02-0.12662762E-05 0.13370773E-09-0.62057755E-14    2
-0.36616558E+04-0.21445749E02 0.98070252E+00 0.16218642E-01-0.58109285E-05    3
 0.59742038E-10 0.26217044E-12-0.16838831E+04 0.80124340E01                    4
mp2oo     07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.26913273E02 0.28691557E-02-0.24992860E-06 0.12924837E-10-0.32272307E-15    2
-0.66359500E+05-0.12136913E+03 0.30459130E+00 0.58496322E-01-0.35781439E-04    3
 0.57055782E-08 0.81721533E-12-0.57307242E+05 0.22473783E02                    4
mpmoo     07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.31313429E01 0.47520597E-01-0.18864524E-04 0.33566185E-08-0.22324045E-12    2
-0.55882691E+05 0.48065891E+02-0.38695967E+01 0.75783074E-01-0.63105923E-04    3
 0.18769009E-07 0.10258753E-11-0.58631465E+05 0.41574051E02                    4
mp2o      07/09/09    c   4h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.26374914E02 0.30520172E-02-0.26786014E-06 0.12802880E-10-0.21898289E-15    2
-0.56006621E+05-0.11003962E+03-0.11788099E01 0.64090870E-01-0.46991077E-04    3
 0.15582657E-07-0.23309961E-11-0.46824227E+05 0.38010262E02                    4
mpmo      07/09/09    c   4h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.53482108E01 0.50522622E-01-0.20267817E-04 0.36338872E-08-0.24303224E-12    2
-0.45922102E+05 0.68773880E+02-0.52810979E+01 0.80780752E-01-0.72567171E-04    3
 0.26506068E-07-0.12000967E-11-0.49211797E+05 0.56817032E02                    4
mp3oh2j   07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.40571671E+01 0.53671043E-01-0.21926800E-04 0.39818793E-08-0.26871913E-12    2
-0.40037555E+05 0.68100937E+02 0.83691694E-01 0.78597628E-01-0.81247381E-04    3
 0.40725975E-07-0.68189178E-11-0.44744164E+05 0.33620125E02                    4
mp2oohmj  07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.29448387E02 0.21381550E-02-0.11332101E-06-0.12209748E-11 0.45358630E-15    2
-0.51411547E+05-0.12020856E+03 0.66901225E+00 0.73431008E-01-0.68806206E-04    3
 0.34168032E-07-0.79817316E-11-0.42326848E+05 0.32251705E02                    4
mpmooh2j  07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.27234278E01 0.50303701E-01-0.20004041E-04 0.35641043E-08-0.23728168E-12    2
-0.44109410E+05 0.59634705E+02-0.24289565E01 0.82656533E-01-0.77063261E-04    3
 0.29414197E-07-0.17173135E-11-0.47727078E+05 0.45530663E02                    4
mp2ooh    07/09/09    c   4h   8o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.29724308E01 0.40414147E-02-0.48158557E-06 0.32739991E-10-0.10242152E-14    2
-0.76030883E+05-0.12392918E+03 0.16206492E+01 0.63836284E-01-0.39371818E-04    3
 0.60540044E-08 0.11722829E-11-0.66601227E+05 0.27553856E02                    4
mpmooh    07/09/09    c   4h   8o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.56792107E01 0.58903471E-01-0.25125180E-04 0.47032849E-08-0.32433537E-12    2
-0.63604203E+05 0.75602478E+02-0.28046467E+01 0.82665056E-01-0.69777067E-04    3
 0.21437250E-07 0.86140166E-12-0.67896234E+05 0.48435631E02                    4
mpcy2om   07/09/09    c   4h   6o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.56792107E01 0.58903471E-01-0.25125180E-04 0.47032849E-08-0.32433537E-12    2
-0.63604203E+05 0.75602478E+02-0.28046467E+01 0.82665056E-01-0.69777067E-04    3
 0.21437250E-07 0.86140166E-12-0.67896234E+05 0.48435631E02                    4
mp2ooh3j  07/09/09    c   4h   7o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.29448387E02 0.21381550E-02-0.11332101E-06-0.12209748E-11 0.45358630E-15    2
-0.51411547E+05-0.12020856E+03 0.66901225E+00 0.73431008E-01-0.68806206E-04    3
 0.34168032E-07-0.79817316E-11-0.42326848E+05 0.32251705E02                    4
mpm*o     07/09/09    c   4h   6o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.23294063E01 0.37870526E-01-0.15672378E-04 0.28714073E-08-0.19497002E-12    2
-0.64009422E+05 0.26266815E02 0.25692534E01 0.47101416E-01-0.30121351E-04    3
 0.64254886E-08 0.11734199E-11-0.65210590E+05 0.21076817E02                    4
mp3ooh2oo 07/09/09    c   4h   7o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.30692610E02 0.39009349E-02-0.39717708E-06 0.22441956E-10-0.52576664E-15    2
-0.77498594E+05-0.13261633E+03 0.21454446E+01 0.67941323E-01-0.46139976E-04    3
 0.96836645E-08 0.58559017E-12-0.68256555E+05 0.20044571E02                    4
mp2oo3oo  07/09/09    c   4h   7o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.30692610E02 0.39009349E-02-0.39717708E-06 0.22441956E-10-0.52576664E-15    2
-0.77498594E+05-0.13330942E+03 0.21454446E+01 0.67941323E-01-0.46139976E-04    3
 0.96836645E-08 0.58559017E-12-0.68256555E+05 0.19351492E02                    4
mp2oohmoo 07/09/09    c   4h   7o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.28697413E+00 0.54510034E-01-0.21827647E-04 0.39079779E-08-0.26106981E-12    2
-0.59028781E+05 0.53291378E+02-0.36713052E+01 0.10121258E+00-0.93646478E-04    3
 0.32840877E-07-0.75686777E-12-0.62189930E+05 0.56356522E02                    4
mpmooh2oo 07/09/09    c   4h   7o   6    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
-0.47185412E+00 0.51469352E-01-0.20581478E-04 0.36816028E-08-0.24581013E-12    2
-0.68140305E+05 0.41387772E+02-0.36816089E+01 0.92339389E-01-0.80767699E-04    3
 0.25003025E-07 0.89869740E-12-0.70862758E+05 0.45389774E02                    4
mp2ooh3*o 07/09/09    c   4h   6o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.30630445E+02-0.41799773E-02 0.59666190E-05-0.16310406E-08 0.13853031E-12    2
-0.89683680E+05-0.12410690E+03-0.19908871E+00 0.48084322E-01-0.14326492E-04    3
-0.37638626E-08 0.13308118E-11-0.77927172E+05 0.47151108E02                    4
mpmooh2*o 07/09/09    c   4h   6o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.30630445E+02-0.41799773E-02 0.59666190E-05-0.16310406E-08 0.13853031E-12    2
-0.89683680E+05-0.12410690E+03-0.19908871E+00 0.48084322E-01-0.14326492E-04    3
-0.37638626E-08 0.13308118E-11-0.77927172E+05 0.47151108E02                    4
mp2oohm*o 07/09/09    c   4h   6o   5    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.51523318E+01 0.41548714E-01-0.17256607E-04 0.31698340E-08-0.21563705E-12    2
-0.76333117E+05 0.18672310E+02 0.27722230E+01 0.63568585E-01-0.47609323E-04    3
 0.12529431E-07 0.10764447E-11-0.77443688E+05 0.24827118E02                    4
paoj2*o   07/09/09    c   3h   3o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.38000273E+05 0.42121006E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.38000273E+05 0.42121006E02                    4
ba        11/28/99    c   4h   8o   2    0g   300.000   5000.000 1388.000    41
 1.59315148e+01 1.84348921e-02-6.29735565e-06 9.77063478e-10-5.66686728e-14    2
-6.47385005e+04-5.90905159e+01 7.40305515e-01 5.48769062e-02-4.05898366e-05    3
 1.60517192e-08-2.65244893e-12-5.95033056e+04 2.22505379e+01                   4
mp3oh     11/28/99    c   4h   8o   3    0g   300.000   5000.000 1382.000    51
 1.75221421e+01 1.97497563e-02-6.86824120e-06 1.07818372e-09-6.30359999e-14    2
-7.78338919e+04-6.21287032e+01 3.78139852e+00 4.87743922e-02-3.01973573e-05    3
 9.72508084e-09-1.33441859e-12-7.26394398e+04 1.29524984e+01                   4
mp2oh     11/28/99    c   4h   8o   3    0g   300.000   5000.000 1388.000    51
 1.87686218e+01 1.87513169e-02-6.53846238e-06 1.02833668e-09-6.02028329e-14    2
-7.98406091e+04-6.99333394e+01 1.22640925e+00 6.00102288e-02-4.42912753e-05    3
 1.70779593e-08-2.73032616e-12-7.37259073e+04 2.42660821e+01                   4
mp3ooh    11/28/99    c   4h   8o   4    0g   300.000   5000.000 1376.000    61
 2.04114505e+01 1.96811529e-02-6.90521854e-06 1.09048293e-09-6.40229131e-14    2
-7.13522006e+04-7.45251161e+01 5.39520110e+00 4.93756163e-02-2.77530220e-05    3
 7.07203979e-09-6.09217624e-13-6.55193221e+04 8.16720030e+00                   4
mp2oh3ooh 11/28/99    c   4h   8o   5    0g   300.000   5000.000 1389.000    71
 2.41196733e+01 1.85941578e-02-6.51728696e-06 1.02861917e-09-6.03691070e-14    2
-9.19629402e+04-9.09269884e+01 4.11708071e+00 6.59834710e-02-4.98484077e-05    3
 1.92591824e-08-3.03610823e-12-8.50750561e+04 1.62788391e+01                   4
c5h7o2alt 11/28/99    c   5h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1382.000    41
 1.90729052e+01 1.66585375e-02-5.88316164e-06 9.33195149e-10-5.49587632e-14    2
-3.17737234e+04-7.22232530e+01 1.42415968e+00 5.73051346e-02-4.20518709e-05    3
 1.58316466e-08-2.45913384e-12-2.55391545e+04 2.28503019e+01                   4
c5h7o2    11/28/99    c   5h   7o   2    0g   300.000   5000.000 1379.000    41
 1.82623737e+01 1.73785356e-02-6.13910755e-06 9.73984196e-10-5.73692006e-14    2
-3.02996668e+04-6.98442618e+01 9.98401068e-01 5.44041933e-02-3.55466741e-05    3
 1.12528385e-08-1.39202431e-12-2.39532533e+04 2.40832606e+01                   4
mb4j*o    11/28/99    c   5h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1373.000    51
 1.94102021e+01 1.84335491e-02-6.48009491e-06 1.02463804e-09-6.02087278e-14    2
-5.40515840e+04-6.92144592e+01 6.38426236e+00 4.37450180e-02-2.41898607e-05    3
 6.30686346e-09-6.26838199e-13-4.88853020e+04 2.78080598e+00                   4
mbmj*o    11/28/99    c   5h   7o   3    0g   300.000   5000.000 1386.000    51
 2.00506288e+01 1.76795859e-02-6.17293681e-06 9.71744630e-10-5.69273631e-14    2
-5.29824268e+04-7.60130076e+01 3.08666210e+00 5.76146250e-02-4.27917498e-05    3
 1.65945506e-08-2.66852301e-12-4.70701309e+04 1.50737674e+01                   4
mb2d      11/28/99    c   5h   8o   2    0g   300.000   5000.000 1382.000    41
 1.80897111e+01 1.98686931e-02-6.95006986e-06 1.09534848e-09-6.42176494e-14    2
-4.97652739e+04-6.65655065e+01 2.12280888e+00 5.41231045e-02-3.47438144e-05    3
 1.13620695e-08-1.54117689e-12-4.38302847e+04 2.04119815e+01                   4
mb2d-z    11/28/99    c   5h   8o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000     1
 3.01472685E+00 0.40006172E-01-0.15570946E-04 0.27332296E-08-0.18009154E-12    2
-4.29313254E+04 2.13687073E+01 0.11644306E+01 0.54965965E-01-0.35343757E-04    3
 0.83106002E-08 0.90585211E-12-0.43581520E+05 0.26946104E02                    4
mb3d      11/28/99    c   5h   8o   2    0g   300.000   5000.000 1384.000    41
 1.81198114e+01 1.98228224e-02-6.92991482e-06 1.09176485e-09-6.39917285e-14    2
-4.71489742e+04-6.76519597e+01 9.53846565e-01 5.80042013e-02-3.94176609e-05    3
 1.37938985e-08-2.00503547e-12-4.09300863e+04 2.53322728e+01                   4
```

```
mb4*o      11/28/99        c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1375.000    51
 1.97941596e+01 2.06252716e-02-7.22918339e-06 1.14082169e-09-6.69430136e-14    2
-7.30040810e+04-7.29449904e+01 5.63718132e+00 4.84424662e-02-2.71323608e-05    3
 7.33939250e-09-7.87676907e-13-6.74180240e+04 5.19514478e+00                   4
mbm*o      11/28/99        c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    51
 2.04657217e+01 1.98095605e-02-6.89317189e-06 1.08265848e-09-6.33244680e-14    2
-7.66732544e+04-7.97684052e+01 2.28892965e+00 6.25201246e-02-4.59995280e-05    3
 1.77521590e-08-2.84909209e-12-7.03256425e+04 1.78663076e+01                   4
mb4ooh2d  11/28/99        c   5h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.37181448e+01 1.94314332e-02-6.82205265e-06 1.07785955e-09-6.33039447e-14    2
-5.98541455e+04-8.99243858e+01 4.52536393e+00 6.37637717e-02-4.64121275e-05    3
 1.74413669e-08-2.70995045e-12-5.30867991e+04 1.34202235e+01                   4
mbmooh2d  11/28/99        c   5h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    61
 2.49369877e+01 1.83355255e-02-6.43129388e-06 1.01559794e-09-5.96292879e-14    2
-6.51868368e+04-9.61915647e+01 2.11018946e+00 7.52819231e-02-6.16991862e-05    3
 2.57442262e-08-4.33473116e-12-5.76359402e+04 2.50959030e+01                   4
mb2oh4*o  11/28/99        c   5h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.26019361e+01 2.03250617e-02-7.11749595e-06 1.12257982e-09-6.58494118e-14    2
-9.34201697e+04-8.45057730e+01 3.78269823e+00 6.40651126e-02-4.68161323e-05    3
 1.79699945e-08-2.88380119e-12-8.67765126e+04 1.67903151e+01                   4
mb3oh4*o  11/28/99        c   5h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1385.000    61
 2.26019361e+01 2.03250617e-02-7.11749595e-06 1.12257982e-09-6.58494118e-14    2
-9.34201697e+04-8.45057730e+01 3.78269823e+00 6.40651126e-02-4.68161323e-05    3
 1.79699945e-08-2.88380119e-12-8.67765126e+04 1.67903151e+01                   4
mb3oh2*o  11/28/99        c   5h   8o   4    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.29425739e+01 2.03697086e-02-7.21101764e-06 1.14565076e-09-6.75462038e-14    2
-9.35909513e+04-8.59839783e+01 1.60415268e+00 6.76145367e-02-4.68180792e-05    3
 1.62121517e-08-2.28074674e-12-8.58789168e+04 2.96134072e+01                   4
mb3ooh2*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1381.000    71
 2.70850239e+01 1.90700609e-02-6.78565465e-06 1.08179340e-09-6.39354271e-14    2
-8.60146287e+04-1.06435383e+02 3.06500375e+00 7.44683771e-02-5.55186222e-05    3
 2.06166827e-08-3.08653052e-12-7.76124588e+04 2.28068555e+01                   4
mb4ooh2*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1367.000    71
 2.41821539e+01 2.15482868e-02-7.64246116e-06 1.21566594e-09-7.17334011e-14    2
-8.49466965e+04-8.82514366e+01 5.86588353e+00 5.57208858e-02-2.85363118e-05    3
 5.22841316e-09 4.16878653e-14-7.76576475e+04 1.32911262e+01                   4
mbmooh2*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1381.000    71
 2.65629481e+01 1.94593967e-02-6.90696887e-06 1.09929527e-09-6.48938708e-14    2
-8.84146776e+04-1.01600281e+02 3.36428916e+00 7.33195958e-02-5.50102344e-05    3
 2.08640147e-08-3.22600925e-12-8.03027523e+04 2.31509046e+01                   4
mb2ooh4*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.68355018e+01 1.89986544e-02-6.69471314e-06 1.06040396e-09-6.23898233e-14    2
-8.59535793e+04-1.05649263e+02 4.62125471e+00 7.26240793e-02-5.70724050e-05    3
 2.29842891e-08-3.77704460e-12-7.83877240e+04 1.30848966e+01                   4
mb3ooh4*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.68355018e+01 1.89986544e-02-6.69471314e-06 1.06040396e-09-6.23898233e-14    2
-8.59535793e+04-1.05649263e+02 4.62125471e+00 7.26240793e-02-5.70724050e-05    3
 2.29842891e-08-3.77704460e-12-7.83877240e+04 1.30848966e+01                   4
mb2oohm*o 11/28/99        c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1397.000    71
 2.75058644e+01 1.81621246e-02-6.34694110e-06 9.99947831e-10-5.86198834e-14    2
-8.96155588e+04-1.12446826e+02 1.37088959e+00 8.63325490e-02-7.54672030e-05    3
 3.31294256e-08-5.78258286e-12-8.13117889e+04 2.52896737e+01                   4
mb4j       11/28/99        c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    51
 1.86469757e+01 2.14568602e-02-7.48357349e-06 1.17708065e-09-6.89125730e-14    2
-3.84612078e+04-6.84770371e+01 3.80046694e+00 5.12461895e-02-2.92784207e-05    3
 8.08008533e-09-8.67877952e-13-3.27047167e+04 1.31818194e+01                   4
mb3j       11/28/99        c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1360.000    51
 1.87286876e+01 2.06468062e-02-7.05571540e-06 1.09601350e-09-6.36503391e-14    2
-3.98818929e+04-6.84337588e+01 4.23259914e+00 4.61048242e-02-1.97581616e-05    3
 1.29579481e-09 7.73894868e-13-3.40101872e+04 1.23994876e+01                   4
mb2j       11/28/99        c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 1.93382201e+01 2.09401493e-02-7.32209753e-06 1.15371679e-09-6.76297088e-14    2
-4.12852468e+04-7.55834444e+01 2.31680806e+00 5.69247905e-02-3.56059275e-05    3
 1.10212330e-08-1.36558032e-12-3.49304634e+04 1.72843303e+01                   4
mbmj       11/28/99        c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1390.000    51
 1.87822563e+01 2.09831341e-02-7.23950265e-06 1.13048403e-09-6.58524760e-14    2
-3.87460441e+04-6.93949815e+01 2.73723554e+00 5.65367209e-02-3.71218633e-05    3
 1.25308215e-08-1.74166718e-12-3.29394021e+04 1.75304537e+01                   4
mb4o       11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1382.000    51
 2.06375124e+01 2.23216370e-02-7.78401166e-06 1.22423957e-09-7.16704098e-14    2
-5.56901732e+04-7.75496703e+01 3.67824444e+00 5.85187362e-02-3.70507685e-05    3
 1.20353269e-08-1.63522073e-12-4.93520453e+04 1.49257879e+01                   4
mb3o       11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    51
 2.12246355e+01 2.18066703e-02-7.60243241e-06 1.19545912e-09-6.99760834e-14    2
-5.79870079e+04-8.10512860e+01 3.13467578e+00 6.30456975e-02-4.42387253e-05    3
 1.64295867e-08-2.57646370e-12-5.14999905e+04 1.66385677e+01                   4
mb2o       11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1388.000    51
 2.19086180e+01 2.12984216e-02-7.44484957e-06 1.17284216e-09-6.87435476e-14    2
-5.77030409e+04-8.54884588e+01 1.10723649e+00 6.98963165e-02-5.13654106e-05    3
 1.95192515e-08-3.05845387e-12-5.04383329e+04 2.62970853e+01                   4
mbmo       11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1377.000    51
 2.06107774e+01 2.23923237e-02-7.81939315e-06 1.23093790e-09-7.21089360e-14    2
-6.17784710e+04-7.81319167e+01 5.10625642e+00 5.23330759e-02-2.79738832e-05    3
 6.53560014e-09-4.50018254e-13-5.56673735e+04 7.53177303e+00                   4
mb4oh3j   11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1365.000    61
 2.04747726e+01 2.11407817e-02-7.19507820e-06 1.11463612e-09-6.46110406e-14    2
-5.83798358e+04-7.32783890e+01 4.80276319e+00 5.08772473e-02-2.55208868e-05    3
 4.48802201e-09 1.21789913e-13-5.22588125e+04 1.33170844e+01                   4
mb2oh3j   11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1377.000    61
 2.15959828e+01 2.02105376e-02-6.87999133e-06 1.06613311e-09-6.18168118e-14    2
-6.03147751e+04-8.03103172e+01 2.17131567e+00 6.26699582e-02-4.09124821e-05    3
 1.28380127e-08-1.52146068e-12-5.33376241e+04 2.49496214e+01                   4
mb3oh4j   11/28/99        c   5h   9o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    61
 2.09759334e+01 2.15152369e-02-7.48381906e-06 1.17499515e-09-6.87035811e-14    2
-5.92529511e+04-7.68048747e+01 3.98781775e+00 6.00803666e-02-4.16474031e-05    3
 1.53723419e-08-2.40874305e-12-5.31331221e+04 1.50116192e+01                   4
mb3ooh3j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1378.000    71
 2.33404967e+01 2.17439388e-02-7.58860497e-06 1.19410676e-09-6.99296867e-14    2
-5.60521877e+04-8.53955279e+01 8.96906512e+00 4.90868502e-02-2.55220895e-05    3
 5.65769198e-09-3.28688689e-13-5.03334204e+04-5.82494239e+00                   4
mb4oox     11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1378.000    61
 2.12057766e+01 2.39899967e-02-8.36517435e-06 1.31550730e-09-7.70057845e-14    2
-5.74358281e+04-7.63886529e+01 6.02462803e+00 5.29337859e-02-2.77099866e-05    3
 6.47884478e-09-4.87532752e-13-5.13701878e+04 7.69531750e+00                   4
mb4oo      11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1378.000    61
 2.12057766e+01 2.39899967e-02-8.36517435e-06 1.31550730e-09-7.70057845e-14    2
-5.74358281e+04-7.63886529e+01 6.02462803e+00 5.29337859e-02-2.77099866e-05    3
 6.47884478e-09-4.87532752e-13-5.13701878e+04 7.69531750e+00                   4
mb4ooh3j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1363.000    71
 2.41329384e+01 2.05544504e-02-7.07983726e-06 1.10565220e-09-6.44507615e-14    2
-5.20558724e+04-8.98144867e+01 6.70425758e+00 5.39176958e-02-2.79249662e-05    3
 5.09136196e-09 1.05861293e-13-4.52961359e+04 6.35357127e+00                   4
mb4ooh2j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1383.000    71
 2.47117275e+01 2.07697011e-02-7.29773709e-06 1.15365726e-09-6.77826421e-14    2
-5.34232243e+04-9.67218753e+01 5.12450156e+00 6.31981169e-02-4.15218802e-05    3
 1.33915001e-08-1.70866251e-12-4.62653960e+04 9.69474403e+00                   4
mb4oohmj  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.38929786e+01 2.10414320e-02-7.29445649e-06 1.14278207e-09-6.67219644e-14    2

-5.07662721e+04-8.89959777e+01 5.60186877e+00 6.26287511e-02-4.33273015e-05    3
 1.53549021e-08-2.22730218e-12-4.42815251e+04 9.67460774e+00                   4
mb3oox     11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    61
 2.16332137e+01 2.35522969e-02-8.19715973e-06 1.28746765e-09-7.52984877e-14    2
-5.96222400e+04-8.00363845e+01 5.29418016e+00 5.78295087e-02-3.54164037e-05    3
 1.11894585e-08-1.49582244e-12-5.34244911e+04 9.32139264e+00                   4
mb3oo      11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    61
 2.16332137e+01 2.35522969e-02-8.19715973e-06 1.28746765e-09-7.52984877e-14    2
-5.96222400e+04-8.00363845e+01 5.29418016e+00 5.78295087e-02-3.54164037e-05    3
 1.11894585e-08-1.49582244e-12-5.34244911e+04 9.32139264e+00                   4
mb3ooh4j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    71
 2.32892832e+01 2.18828212e-02-7.65921463e-06 1.20762113e-09-7.08215163e-14    2
-5.25581977e+04-8.70829324e+01 5.08152486e+00 6.11236844e-02-3.95876089e-05    3
 1.29911692e-08-1.75536907e-12-4.58243664e+04 1.20107344e+01                   4
mb3ooh2j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.50421784e+01 2.04126665e-02-7.15711118e-06 1.12984269e-09-6.63191853e-14    2
-5.55868567e+04-9.98450348e+01 4.29061604e+00 6.81727120e-02-4.92396447e-05    3
 1.80947009e-08-2.71474104e-12-4.82922511e+04 1.18872149e+01                   4
mb3oohmj  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1396.000    71
 2.42414448e+01 2.06492679e-02-7.13757687e-06 1.11601947e-09-6.50708463e-14    2
-5.29361060e+04-9.22136886e+01 4.73273787e+00 6.77264408e-02-5.11878816e-05    3
 2.01199902e-08-3.24214075e-12-4.63021994e+04 1.20420428e+01                   4
mb2ooh4j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.60863247e+01 1.95570019e-02-6.86994040e-06 1.08593776e-09-6.38027910e-14    2
-5.15746710e+04-1.03489553e+02 2.97132306e+00 7.51236128e-02-5.83968221e-05    3
 2.30228066e-08-3.67522363e-12-4.37225432e+04 2.00673772e+01                   4
mb2ooh3j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1387.000    71
 2.52348349e+01 1.98488294e-02-6.87788757e-06 1.07773530e-09-6.29497572e-14    2
-5.26206474e+04-9.81217615e+01 3.31422015e+00 7.02311393e-02-5.03639684e-05    3
 1.78228643e-08-2.49025119e-12-4.50022447e+04 1.97722797e+01                   4
mb2oohmj  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1402.000    71
 2.55169563e+01 1.95608975e-02-6.76289951e-06 1.05776377e-09-6.16928239e-14    2
-5.15436509e+04-1.00256011e+02 2.11723189e+00 7.90943359e-02-6.53767287e-05    3
 2.74641018e-08-4.62344366e-12-4.39684978e+04 2.35797648e+01                   4
mbmoox     11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.29983447e+01 2.22214703e-02-7.69966028e-06 1.20576967e-09-7.03767364e-14    2
-6.06244269e+04-8.62310682e+01 3.91998917e+00 6.82937112e-02-5.16228283e-05    3
 2.08593299e-08-3.52067891e-12-5.40543953e+04 1.58576906e+01                   4
mbmoo      11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1390.000    61
 2.29983447e+01 2.22214703e-02-7.69966028e-06 1.20576967e-09-7.03767364e-14    2
-6.06244269e+04-8.62310682e+01 3.91998917e+00 6.82937112e-02-5.16228283e-05    3
 2.08593299e-08-3.52067891e-12-5.40543953e+04 1.58576906e+01                   4
mbmooh4j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.50468053e+01 2.02467629e-02-7.06274157e-06 1.11114085e-09-6.50663047e-14    2
-5.36793150e+04-9.54708396e+01 3.72368656e+00 7.25844305e-02-5.73119694e-05    3
 2.35096308e-08-3.94776891e-12-4.64916264e+04 1.82120105e+01                   4
mbmooh3j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1382.000    71
 2.52248929e+01 1.92907689e-02-6.57169887e-06 1.01897470e-09-5.91108595e-14    2
-5.51356886e+04-9.59674469e+01 3.87879606e+00 6.85953403e-02-4.93389087e-05    3
 1.75720674e-08-2.47232547e-12-4.77536429e+04 1.87311402e+01                   4
mbmooh2j  11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1393.000    71
 2.62433280e+01 1.93766222e-02-6.79721316e-06 1.07348419e-09-6.30328826e-14    2
-5.67444508e+04-1.05577152e+02 2.09507094e+00 7.89028273e-02-6.36048874e-05    3
 2.59844097e-08-4.27897186e-12-4.87020537e+04 2.29569579e+01                   4
mb2oox     11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.39858210e+01 2.15853843e-02-7.52744905e-06 1.18399497e-09-6.93214730e-14    2
-5.85136568e+04-9.39864883e+01 3.19155163e+00 7.04371930e-02-5.19794760e-05    3
 1.98887214e-08-3.13840389e-12-5.12803874e+04 1.76613732e+01                   4
mb2oo      11/28/99        c   5h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.39858210e+01 2.15853843e-02-7.52744905e-06 1.18399497e-09-6.93214730e-14    2
-5.85136568e+04-9.39864883e+01 3.19155163e+00 7.04371930e-02-5.19794760e-05    3
 1.98887214e-08-3.13840389e-12-5.12803874e+04 1.76613732e+01                   4
mb2ooh3o  11/28/99        c   5h   9o   5    0g   300.000  5000.000 1394.000    71
 2.89994635e+01 1.96490504e-02-6.90652516e-06 1.09221580e-09-6.41933513e-14    2
-7.12443999e+04-1.18023422e+02 2.18014641e+00 8.76734505e-02-7.39784139e-05    3
 3.15040891e-08-5.37432911e-12-6.25085590e+04 2.40412419e+01                   4
inter8     11/28/99        c   5h   9o   5    0g   300.000  5000.000 1381.000    81
 2.50435858e+01 2.22647989e-02-7.73352678e-06 1.21309191e-09-7.08875061e-14    2
-7.45239950e+04-8.99789884e+01 9.26226438e+00 5.51140925e-02-3.32340739e-05    3
 1.00767081e-08-1.25169749e-12-6.85403163e+04-3.62710095e+00                   4
mb3oh4oo  11/28/99        c   5h   9o   5    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.42348672e+01 2.33791046e-02-8.11752196e-06 1.27291127e-09-7.43632425e-14    2
-7.83158287e+04-8.83426923e+01 6.82076367e+00 6.26862027e-02-4.28355893e-05    3
 1.57186773e-08-2.46828189e-12-7.20002019e+04 5.88891952e+00                   4
mb2oh3oo  11/28/99        c   5h   9o   5    0g   300.000  5000.000 1392.000    71
 2.51497628e+01 2.25779991e-02-7.83678500e-06 1.22870792e-09-7.17763813e-14    2
-8.01433560e+04-9.52997103e+01 4.06288722e+00 7.41147900e-02-5.73305704e-05    3
 2.33973372e-08-3.94545505e-12-7.29814806e+04 1.72542099e+01                   4
mb4oohmoo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1391.000    81
 2.84270587e+01 2.20552782e-02-7.68807742e-06 1.20888169e-09-7.07619347e-14    2
-7.27968210e+04-1.07724315e+02 6.66761447e+00 7.48831434e-02-5.79318356e-05    3
 2.34591240e-08-3.91522378e-12-6.53824251e+04 8.52661304e+00                   4
mbmooh4oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1391.000    81
 2.84270587e+01 2.20552782e-02-7.68807742e-06 1.20888169e-09-7.07619347e-14    2
-7.27968210e+04-1.07724315e+02 6.66761447e+00 7.48831434e-02-5.79318356e-05    3
 2.34591240e-08-3.91522378e-12-6.53824251e+04 8.52661304e+00                   4
mb4ooh3oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.77650492e+01 2.27074787e-02-7.93315220e-06 1.24924395e-09-7.31978133e-14    2
-7.18949321e+04-1.05190803e+02 8.56076558e+00 6.55209024e-02-4.45967625e-05    3
 1.57484890e-08-2.32446252e-12-6.49345264e+04-1.17885672e+00                   4
mb4ooh3oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.77650492e+01 2.27074787e-02-7.93315220e-06 1.24924395e-09-7.31978133e-14    2
-7.18949321e+04-1.05190803e+02 8.56076558e+00 6.55209024e-02-4.45967625e-05    3
 1.57484890e-08-2.32446252e-12-6.49345264e+04-1.17885672e+00                   4
mb3ooh4oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.77650492e+01 2.27074787e-02-7.93315220e-06 1.24924395e-09-7.31978133e-14    2
-7.18949321e+04-1.05190803e+02 8.56076558e+00 6.55209024e-02-4.45967625e-05    3
 1.57484890e-08-2.32446252e-12-6.49345264e+04-1.17885672e+00                   4
mb3ooh4oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1385.000    81
 2.77650492e+01 2.27074787e-02-7.93315220e-06 1.24924395e-09-7.31978133e-14    2
-7.18949321e+04-1.05190803e+02 8.56076558e+00 6.55209024e-02-4.45967625e-05    3
 1.57484890e-08-2.32446252e-12-6.49345264e+04-1.17885672e+00                   4
mb4ooh2oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.90071693e+01 2.16747209e-02-7.58319692e-06 1.19538557e-09-7.00964210e-14    2
-7.04909580e+04-1.13048853e+02 5.95502325e+00 7.68501018e-02-5.87551606e-05    3
 2.30966174e-08-3.71083729e-12-6.26022905e+04 1.03133942e+01                   4
mb4ooh2oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.90071693e+01 2.16747209e-02-7.58319692e-06 1.19538557e-09-7.00964210e-14    2
-7.04909580e+04-1.13048853e+02 5.95502325e+00 7.68501018e-02-5.87551606e-05    3
 2.30966174e-08-3.71083729e-12-6.26022905e+04 1.03133942e+01                   4
mb2ooh4oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.90071693e+01 2.16747209e-02-7.58319692e-06 1.19538557e-09-7.00964210e-14    2
-7.04909580e+04-1.13048853e+02 5.95502325e+00 7.68501018e-02-5.87551606e-05    3
 2.30966174e-08-3.71083729e-12-6.26022905e+04 1.03133942e+01                   4
mb2ooh4oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1390.000    81
 2.90071693e+01 2.16747209e-02-7.58319692e-06 1.19538557e-09-7.00964210e-14    2
-7.04909580e+04-1.13048853e+02 5.95502325e+00 7.68501018e-02-5.87551606e-05    3
 2.30966174e-08-3.71083729e-12-6.26022905e+04 1.03133942e+01                   4
mb3ooh2oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.93434817e+01 2.13048369e-02-7.43648047e-06 1.17045425e-09-6.85614300e-14    2
-7.26575927e+04-1.16206732e+02 5.07851070e+00 8.19797597e-02-6.66746848e-05    3
 2.79093007e-08-4.73836746e-12-6.46217521e+04 1.27105474e+01                   4
mb3ooh2oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.93434817e+01 2.13048369e-02-7.43648047e-06 1.17045425e-09-6.85614300e-14    2
-7.26575927e+04-1.16206732e+02 5.07851070e+00 8.19797597e-02-6.66746848e-05    3
 2.79093007e-08-4.73836746e-12-6.46217521e+04 1.27105474e+01                   4
mb2ooh3oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.93434817e+01 2.13048369e-02-7.43648047e-06 1.17045425e-09-6.85614300e-14    2
-7.26575927e+04-1.16206732e+02 5.07851070e+00 8.19797597e-02-6.66746848e-05    3
 2.79093007e-08-4.73836746e-12-6.46217521e+04 1.27105474e+01                   4
mb2ooh3oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.93434817e+01 2.13048369e-02-7.43648047e-06 1.17045425e-09-6.85614300e-14    2
-7.26575927e+04-1.16206732e+02 5.07851070e+00 8.19797597e-02-6.66746848e-05    3
 2.79093007e-08-4.73836746e-12-6.46217521e+04 1.27105474e+01                   4
mb3oohmoo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.87650717e+01 2.16810575e-02-7.53923878e-06 1.18355497e-09-6.92013596e-14    2
-7.49632984e+04-1.10884940e+02 5.79516909e+00 7.99965863e-02-6.58250024e-05    3
 2.82522727e-08-4.93771961e-12-6.74025753e+04 1.09094515e+01                   4
mbmooh3oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.87650717e+01 2.16810575e-02-7.53923878e-06 1.18355497e-09-6.92013596e-14    2
-7.49632984e+04-1.10884940e+02 5.79516909e+00 7.99965863e-02-6.58250024e-05    3
 2.82522727e-08-4.93771961e-12-6.74025753e+04 1.09094515e+01                   4
mb2oohmoox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1398.000    81
 3.00468945e+01 2.05673888e-02-7.15129275e-06 1.12274545e-09-6.56548206e-14    2
-7.35714456e+04-1.18960406e+02 3.01166062e+00 9.20553284e-02-8.09971927e-05    3
 3.61726117e-08-6.43941510e-12-6.50418839e+04 2.32372614e+01                   4
mb2oohmoo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1398.000    81
 3.00468945e+01 2.05673888e-02-7.15129275e-06 1.12274545e-09-6.56548206e-14    2
-7.35714456e+04-1.18960406e+02 3.01166062e+00 9.20553284e-02-8.09971927e-05    3
 3.61726117e-08-6.43941510e-12-6.50418839e+04 2.32372614e+01                   4
mbmooh2oox 12/1/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1398.000    81
 3.00468945e+01 2.05673888e-02-7.15129275e-06 1.12274545e-09-6.56548206e-14    2
-7.35714456e+04-1.18960406e+02 3.01166062e+00 9.20553284e-02-8.09971927e-05    3
 3.61726117e-08-6.43941510e-12-6.50418839e+04 2.32372614e+01                   4
mbmooh2oo 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1398.000    81
 3.00468945e+01 2.05673888e-02-7.15129275e-06 1.12274545e-09-6.56548206e-14    2
-7.35714456e+04-1.18960406e+02 3.01166062e+00 9.20553284e-02-8.09971927e-05    3
 3.61726117e-08-6.43941510e-12-6.50418839e+04 2.32372614e+01                   4
mb23ooh2j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1390.000    91
 3.03645598e+01 2.01253443e-02-7.05544050e-06 1.11374139e-09-6.53734397e-14    2
-6.89896166e+04-1.17986873e+02 8.06184033e+00 7.28464967e-02-5.49162555e-05    3
 2.09982521e-08-3.25589259e-12-6.13210254e+04 1.54958306e+00                   4
mb24ooh2j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1386.000    91
 3.00326930e+01 2.04863765e-02-7.19803048e-06 1.13792082e-09-6.68604150e-14    2
-6.68242426e+04-1.14852980e+02 8.93219951e+00 6.77391201e-02-4.70218063e-05    3
 1.61949755e-08-2.22925891e-12-5.93005161e+04-8.18120694e-01                   4
mb24ooh4j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.09999611e+01 1.97229280e-02-6.94851774e-06 1.10049400e-09-6.47451954e-14    2
-6.60040665e+04-1.21553755e+02 7.29698828e+00 7.58523615e-02-5.78776172e-05    3
 2.21940715e-08-3.43082916e-12-5.78811129e+04 5.42450421e+00                   4
mb34ooh3j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1379.000    91
 2.87961837e+01 2.15101482e-02-7.54398598e-06 1.19106381e-09-6.99165532e-14    2
-6.82279443e+04-1.07020876e+02 1.15825554e+01 5.62462912e-02-3.26366473e-05    3
 8.70983050e-09-8.12931061e-13-6.16405275e+04-1.25247032e+01                   4
mb34ooh4j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1383.000    91
 2.97627161e+01 2.07466150e-02-7.29430634e-06 1.15359815e-09-6.77986033e-14    2
-6.74096934e+04-1.13722622e+02 9.89435622e+00 6.45540139e-02-4.37563316e-05    3
 1.48628689e-08-2.04706962e-12-6.02119276e+04-6.02772615e+00                   4
mb34ooh2j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1379.000    91
 2.87961837e+01 2.15101482e-02-7.54398598e-06 1.19106381e-09-6.99165532e-14    2
-6.82279443e+04-1.07020876e+02 1.15825554e+01 5.62462912e-02-3.26366473e-05    3
 8.70983050e-09-8.12931061e-13-6.16405275e+04-1.25247032e+01                   4
mb24ooh3j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1389.000    91
 3.06883371e+01 2.00029921e-02-7.04880408e-06 1.11655306e-09-6.56973510e-14    2
-6.47440427e+04-1.20345251e+02 6.88374543e+00 7.57000595e-02-5.67151993e-05    3
 2.12290958e-08-3.19125002e-12-5.65265966e+04 7.40333687e+00                   4
mb2mooh2j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1396.000    91
 3.10668132e+01 1.93893986e-02-6.77079933e-06 1.06611419e-09-6.24712270e-14    2
-6.99023466e+04-1.20733070e+02 5.97115657e+00 8.30366100e-02-6.94165087e-05    3
 2.93735355e-08-4.98175134e-12-6.17377815e+04 1.21849003e+01                   4
mb2mooh3j 11/28/99        c   5h   9o   6    0g   300.000  5000.000 1398.000    91
 3.17096557e+01 1.89311429e-02-6.63331911e-06 1.04689436e-09-6.14457588e-14    2
-6.78204537e+04-1.26160094e+02 3.93748968e+00 9.09141222e-02-7.89864795e-05    3
```

```
 3.43413675e-08-5.93158194e-12-5.89655279e+04 2.03420561e+01                   4
mb        11/28/99      c   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.90094725e+01 2.36503722e-02-8.22978452e-06 1.29246265e-09-7.55862836e-14    2
-6.34989152e+04-7.32469099e+01 3.16208825e+00 5.52915358e-02-3.11610102e-05    3
 8.42394129e-09-8.72222021e-13-5.73385240e+04 1.39723817e+01                   4
mb4oh     11/28/99      c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1383.000    61
 2.06923634e+01 2.42436298e-02-8.41172945e-06 1.31846724e-09-7.70025338e-14    2
-8.19684138e+04-7.77308783e+01 3.55135315e+00 6.09866240e-02-3.84508751e-05    3
 1.26377744e-08-1.76123953e-12-7.55626387e+04 1.57048953e+01                   4
mb3oh     11/28/99      c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1387.000    61
 2.12483571e+01 2.37804416e-02-8.25357200e-06 1.29391812e-09-7.55777406e-14    2
-8.42644962e+04-8.10792671e+01 3.06882656e+00 6.51050059e-02-4.49677285e-05    3
 1.66160632e-08-2.61316842e-12-7.77157728e+04 1.71653701e+01                   4
mb2oh     11/28/99      c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.19641050e+01 2.32492164e-02-8.08903023e-06 1.27032203e-09-7.42927293e-14    2
-8.39949229e+04-8.57037827e+01 1.01070902e+00 7.21091979e-02-5.22792442e-05    3
 1.97990349e-08-3.11267198e-12-7.66503374e+04 2.69603176e+01                   4
mbmoh     11/28/99      c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.06776617e+01 2.42822097e-02-8.43129357e-06 1.32221094e-09-7.72496377e-14    2
-8.62914229e+04-7.83723649e+01 4.97724389e+00 5.48044011e-02-2.93677228e-05    3
 7.11828957e-09-5.68222087e-13-8.01110251e+04 8.32182213e+00                   4
mb1o1o    11/28/99      c   5h  10o   3    0g   300.000  5000.000 1378.000    51
 2.25363609e+01 2.23000929e-02-7.58272292e-06 1.17398721e-09-6.80237069e-14    2
-8.49587454e+04-8.76313361e+01 2.40114380e+00 6.75257197e-02-4.59635599e-05    3
 1.58776193e-08-2.22558770e-12-7.77853343e+04 2.11534022e+01                   4
mb2ooh    11/28/99      c   5h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1390.000    71
 2.63490360e+01 2.18371147e-02-7.64645131e-06 1.20609525e-09-7.07564645e-14    2
-7.65962363e+04-1.07735677e+02 2.21175044e+00 7.91903494e-02-6.01012211e-05    3
 2.32064167e-08-3.63903108e-12-6.83224439e+04 2.15354918e+01                   4
mb4ooh    11/28/99      c   5h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1379.000    71
 2.36241966e+01 2.41865306e-02-8.46322047e-06 1.33413066e-09-7.82297996e-14    2
-7.55154803e+04-9.04010252e+01 5.19326620e+00 6.14998485e-02-3.58120268e-05    3
 9.85938168e-09-1.01088473e-12-6.84484734e+04 1.07780844e+01                   4
mb3ooh    11/28/99      c   5h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1385.000    71
 2.51064759e+01 2.28502205e-02-7.98489758e-06 1.25764070e-09-7.37015341e-14    2
-7.79675598e+04-9.98042232e+01 4.93171536e+00 6.78528492e-02-4.63114534e-05    3
 1.62087938e-08-2.34460360e-12-7.06857588e+04 9.40839096e+00                   4
mbmooh    11/28/99      c   5h  10o   4    0g   300.000  5000.000 1391.000    71
 2.54600372e+01 2.23896624e-02-7.78997699e-06 1.22341471e-09-7.15534970e-14    2
-7.87412028e+04-1.00538118e+02 2.92428570e+00 7.72731045e-02-6.00053879e-05    3
 2.42815360e-08-4.03433185e-12-7.10996622e+04 1.97656563e+01                   4
mb2ooh3oh 11/28/99      c   5h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1394.000    81
 2.91969406e+01 2.15218510e-02-7.53383144e-06 1.18815446e-09-6.96985302e-14    2
-9.76376923e+04-1.19156043e+02 2.03116812e+00 8.95739266e-02-7.37147091e-05    3
 3.07856295e-08-5.17268116e-12-8.86995914e+04 2.50524373e+01                   4
mb4oh3ooh 11/28/99      c   5h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1387.000    81
 2.64819978e+01 2.36191361e-02-8.20825520e-06 1.28808963e-09-7.52941439e-14    2
-9.63085102e+04-1.02494549e+02 5.31235526e+00 7.31068526e-02-5.32066526e-05    3
 2.03134332e-08-3.22813284e-12-8.88909707e+04 1.13049680e+01                   4
mb3oh4ooh 11/28/99      c   5h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1387.000    81
 2.66927868e+01 2.35546744e-02-8.21133498e-06 1.29120335e-09-7.55818458e-14    2
-9.64344839e+04-1.02635286e+02 5.80860538e+00 7.17048048e-02-5.12642676e-05    3
 1.91709188e-08-2.98948436e-12-8.90419539e+04 9.88074739e+00                   4
mb2oh3ooh 11/28/99      c   5h  10o   5    0g   300.000  5000.000 1392.000    81
 2.84617664e+01 2.21539498e-02-7.75332237e-06 1.22254579e-09-7.17056438e-14    2
-9.86600700e+04-1.14653644e+02 2.67162174e+00 8.49764517e-02-6.69683871e-05    3
 2.68888655e-08-4.37257663e-12-8.99815595e+04 2.29097387e+01                   4
inter1    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.08913577e+01 2.22188367e-02-7.77627654e-06 1.22614345e-09-7.19142871e-14    2
-9.09150427e+04-1.22047116e+02 5.64606547e+00 8.39694629e-02-6.64690950e-05    3
 2.69748249e-08-4.44912851e-12-8.24235472e+04 1.25560460e+01                   4
inter2    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1386.000    91
 3.02235243e+01 2.28857408e-02-8.02857864e-06 1.26785786e-09-7.44379431e-14    2
-9.00113746e+04-1.19481133e+02 7.62045152e+00 7.42690193e-02-5.26492864e-05    3
 1.89777792e-08-2.79797260e-12-8.19885817e+04 2.46943343e+00                   4
inter3    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.14640297e+01 2.18555187e-02-7.67974185e-06 1.21419838e-09-7.13490809e-14    2
-8.86072895e+04-1.27331277e+02 5.00496599e+00 8.56343766e-02-6.68583723e-05    3
 2.63568185e-08-4.19114449e-12-7.96546581e+04 1.40084100e+01                   4
inter4    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1395.000    91
 3.17987922e+01 2.14884996e-02-7.53433990e-06 1.18950492e-09-6.98292213e-14    2
-9.07735193e+04-1.30480856e+02 4.12924992e+00 9.07606986e-02-7.47746298e-05    3
 3.11690527e-08-5.21888798e-12-8.16742367e+04 1.64018790e+01                   4
inter5    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1395.000    91
 3.12293347e+01 2.18447037e-02-7.62748140e-06 1.20082495e-09-7.03542498e-14    2
-9.30815301e+04-1.25207589e+02 4.77301066e+00 8.90856152e-02-7.43664628e-05    3
 3.17706945e-08-5.47224727e-12-8.44436041e+04 1.49417128e+01                   4
inter6    11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1400.000    91
```

```
 3.25086026e+01 2.07382081e-02-7.24311661e-06 1.14068961e-09-6.68516225e-14    2
-9.16893304e+04-1.33269800e+02 2.02372577e+00 1.00997451e-01-8.93241798e-05    3
 3.95631848e-08-6.94686291e-12-8.20882419e+04 2.71098742e+01                   4
mb23ooh   11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1395.000    91
 3.17987922e+01 2.14884996e-02-7.53433990e-06 1.18950492e-09-6.98292213e-14    2
-9.07735193e+04-1.30480856e+02 4.12924992e+00 9.07606986e-02-7.47746298e-05    3
 3.11690527e-08-5.21888798e-12-8.16742367e+04 1.64018790e+01                   4
mb24ooh   11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1392.000    91
 3.14640297e+01 2.18555187e-02-7.67974185e-06 1.21419838e-09-7.13490809e-14    2
-8.86072895e+04-1.27331277e+02 5.00496599e+00 8.56343766e-02-6.68583723e-05    3
 2.63568185e-08-4.19114449e-12-7.96546581e+04 1.40084100e+01                   4
mb34ooh   11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1386.000    91
 3.02235243e+01 2.28857408e-02-8.02857864e-06 1.26785786e-09-7.44379431e-14    2
-9.00113746e+04-1.19481133e+02 7.62045152e+00 7.42690193e-02-5.26492864e-05    3
 1.89777792e-08-2.79797260e-12-8.19885817e+04 2.46943343e+00                   4
mb2mooh   11/28/99      c   5h  10o   6    0g   300.000  5000.000 1400.000    91
 3.25086026e+01 2.07382081e-02-7.24311661e-06 1.14068961e-09-6.68516225e-14    2
-9.16893304e+04-1.33269800e+02 2.02372577e+00 1.00997451e-01-8.93241798e-05    3
 3.95631848e-08-6.94686291e-12-8.20882419e+04 2.71098742e+01                   4
mb1o1oh   11/28/99      c   5h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.26981933e+01 2.40182439e-02-8.11840977e-06 1.25183623e-09-7.23282267e-14    2
-5.89067752e+04-8.84045913e+01 2.30266922e+00 6.97284049e-02-4.68192747e-05    3
 1.60418117e-08-2.23713135e-12-5.16262023e+04 2.18291220e+01                   4
mb1oh1oh  11/28/99      c   5h  12o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    71
 2.28747444e+01 2.57526437e-02-8.66596447e-06 1.33218277e-09-7.68040559e-14    2
-8.52406085e+04-8.92850004e+01 2.20777384e+00 7.18899566e-02-4.75636246e-05    3
 1.61342519e-08-2.23478968e-12-7.78375658e+04 2.24923696e+01                   4
mp3*o     11/26/99      c   4h   6o   3    0g   300.000  5000.000 2021.000    41
 1.47014654e+01 1.91324837e-02-7.10622685e-06 1.16926651e-09-7.07190057e-14    2
-6.76572655e+04-4.57224716e+01 3.05791046e+00 4.08245981e-02-1.91405508e-05    3
 2.51837622e-09 2.78176317e-13-6.32919872e+04 1.84703831e+01                   4
mp3*o2*o  11/26/99      c   4h   4o   4    0g   300.000  5000.000 1368.000    41
 1.86227626e+01 1.20767518e-02-4.33452197e-06 6.94991844e-10-4.12383909e-14    2
-8.21784314e+04-6.66972624e+01 2.76326345e+00 4.56905075e-02-2.99282421e-05    3
 8.80210887e-09-8.92878529e-13-7.63767280e+04 1.96178749e+01                   4
mp3j*o    11/26/99      c   4h   5o   3    0g   300.000  5000.000 1674.000    41
 1.60502569e+01 1.52384273e-02-5.70811867e-06 9.44490933e-10-5.73459761e-14    2
-4.64698351e+04-5.22156991e+01 4.96745222e+00 3.62480066e-02-1.77176819e-05    3
 2.48155628e-09 2.42724279e-13-4.23820090e+04 8.71610358e+00                   4
mb4ooh3*o 11/26/99      c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1367.000    71
 2.41821539e+01 2.15482868e-02-7.64246116e-06 1.21566594e-09-7.17334011e-14    2
-8.49466965e+04-8.82514366e+01 5.86588353e+00 5.57208858e-02-2.85363118e-05    3
 5.22841316e-09 4.16878653e-14-7.76576475e+04 1.32911262e+01                   4
mb2ooh3*o 11/26/99      c   5h   8o   5    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 2.68355018e+01 1.89986544e-02-6.69471314e-06 1.06040396e-09-6.23898233e-14    2
-8.59535793e+04-1.05649263e+02 4.62125471e+00 7.26240793e-02-5.70724050e-05    3
 2.29842891e-08-3.77704460e-12-7.83877240e+04 1.30848966e+01                   4
mbcy2om   11/26/99      c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.90094725e+01 2.36503722e-02-8.22978452e-06 1.29246265e-09-7.55862836e-14    2
-6.34989152e+04-7.32469099e+01 3.16208825e+00 5.52915358e-02-3.11610102e-05    3
 8.42394129e-09-8.72222021e-13-5.73385240e+04 1.39723817e+01                   4
mbcy3o2   11/26/99      c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.90094725e+01 2.36503722e-02-8.22978452e-06 1.29246265e-09-7.55862836e-14    2
-6.34989152e+04-7.32469099e+01 3.16208825e+00 5.52915358e-02-3.11610102e-05    3
 8.42394129e-09-8.72222021e-13-5.73385240e+04 1.39723817e+01                   4
mbcy4o2   11/26/99      c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.90094725e+01 2.36503722e-02-8.22978452e-06 1.29246265e-09-7.55862836e-14    2
-6.34989152e+04-7.32469099e+01 3.16208825e+00 5.52915358e-02-3.11610102e-05    3
 8.42394129e-09-8.72222021e-13-5.73385240e+04 1.39723817e+01                   4
mbcy4o3   11/26/99      c   5h   8o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    51
 1.90094725e+01 2.36503722e-02-8.22978452e-06 1.29246265e-09-7.55862836e-14    2
-6.34989152e+04-7.32469099e+01 3.16208825e+00 5.52915358e-02-3.11610102e-05    3
 8.42394129e-09-8.72222021e-13-5.73385240e+04 1.39723817e+01                   4
mp3j*o2*o 11/26/99      c   4h   3o   4    0g   300.000  5000.000 1680.000    41
 1.56402989e+01 1.28101938e-02-4.80948267e-06 7.97000777e-10-4.84417157e-14    2
-5.71167109e+04-4.77731374e+01 4.90663630e+00 3.47395847e-02-1.96251427e-05    3
 4.35757123e-09-1.95937962e-13-5.33101537e+04 1.06735160e+01                   4
mmcy1om   11/28/99      c   2h   2o   3    0g   300.000  5000.000 1686.000    21
 8.69123518e+00 1.15503122e-02-4.27782486e-06 7.02533059e-10-4.24333552e-14    2
-4.64364769e+04-1.89301478e+01 3.08839783e+00 2.03760048e-02-6.84777040e-06    3
-7.28186203e-10 5.62130216e-13-4.41855167e+04 1.25364719e+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 1.37440768e+00 2.49115604e-02-1.74308894e-05    3
 6.24799508e-09-9.09516835e-13-2.72330150e+04 1.81405454e+01                   4
mn         THERGAS      c  10h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.64175713E+02 0.10774842E-02-0.32965743E-08-0.38611453E-11 0.33926234E-15    2
-0.95782477E+05-0.31357739E+03 0.25728519E+01 0.10465467E+00-0.40224608E-04    3
```

```
-0.36817718E-08 0.19183108E-11-0.72025219E+05 0.29240072E+02                   4
mn2j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63514282E+02 0.15104665E-03-0.67142398E-08 0.14315353E-11-0.11174158E-15    2
-0.75043336E+05-0.31013486E+03 0.15897799E+01 0.11433533E+00-0.69738446E-04    3
 0.25201526E-07-0.77177639E-11-0.51723555E+05 0.31835417E+02                   4
mn3j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63188610E+02-0.16082876E-03 0.10346283E-06-0.24416148E-10 0.20024822E-14    2
-0.71609211E+05-0.30562085E+03 0.12345792E+01 0.11787938E+00-0.80981947E-04    3
 0.36474482E-07-0.11486315E-10-0.48473871E+05 0.35550732E+02                   4
mn4j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63188610E+02-0.16082876E-03 0.10346283E-06-0.24416148E-10 0.20024822E-14    2
-0.71609211E+05-0.30562085E+03 0.12345792E+01 0.11787938E+00-0.80981947E-04    3
 0.36474482E-07-0.11486315E-10-0.48473871E+05 0.35550732E+02                   4
mn5j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63188610E+02-0.16082876E-03 0.10346283E-06-0.24416148E-10 0.20024822E-14    2
-0.71609211E+05-0.30562085E+03 0.12345792E+01 0.11787938E+00-0.80981947E-04    3
 0.36474482E-07-0.11486315E-10-0.48473871E+05 0.35550732E+02                   4
mn6j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63188610E+02-0.16082876E-03 0.10346283E-06-0.24416148E-10 0.20024822E-14    2
-0.71609211E+05-0.30562085E+03 0.12345792E+01 0.11787938E+00-0.80981947E-04    3
 0.36474482E-07-0.11486315E-10-0.48473871E+05 0.35550732E+02                   4
mn7j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63188610E+02-0.16082876E-03 0.10346283E-06-0.24416148E-10 0.20024822E-14    2
-0.71609211E+05-0.30562085E+03 0.12345792E+01 0.11787938E+00-0.80981947E-04    3
 0.36474482E-07-0.11486315E-10-0.48473871E+05 0.35550732E+02                   4
mn8j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63096935E+02 0.11687686E-04 0.62271127E-07-0.14907318E-10 0.12337405E-14    2
-0.71614000E+05-0.30519977E+03 0.24502890E+01 0.10930480E+00-0.61572260E-04    3
 0.18465569E-07-0.54748471E-11-0.48593969E+05 0.30465429E+02                   4
mn9j       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63524559E+02-0.16194003E-03 0.52429257E-07-0.12436821E-10 0.10226157E-14    2
-0.70669938E+05-0.30777289E+03 0.16105292E+01 0.11432381E+00-0.69838534E-04    3
 0.24612270E-07-0.72996591E-11-0.47397836E+05 0.33990742E+02                   4
mnmj       THERGAS      c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.63524559E+02-0.16194003E-03 0.52429257E-07-0.12436821E-10 0.10226157E-14    2
-0.71022195E+05-0.30777289E+03 0.16105292E+01 0.11432381E+00-0.69838534E-04    3
 0.24612270E-07-0.72996591E-11-0.47750098E+05 0.33990742E+02                   4
naoj        4/ 3/ 7     c   9h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1386.000    91
 3.21258984e+01 3.77093418e-02-1.27708159e-05 1.97127465e-09-1.13996984e-13    2
-5.60136685e+04-1.37749051e+02 3.92723133e-01 1.10131621e-01-7.58572806e-05    3
 2.70475967e-08-3.96755310e-12-4.47960961e+04 3.33313895e+01                   4
mn2oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.48900162E+02 0.25057998E-01-0.56462022E-05 0.67608696E-09-0.34650312E-13    2
-0.82120242E+05-0.21750688E+03-0.54239607E+00 0.13616984E+00-0.87038381E-04    3
 0.20687223E-07-0.32553655E-12-0.66047484E+05 0.47016796E+02                   4
mn3oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.17386377E+01 0.10012402E+00-0.39432882E-04 0.69764785E-08-0.46207244E-12    2
-0.63546617E+05 0.48195099E+02-0.23899722E+01 0.15068021E+00-0.11672248E-03    3
 0.38574239E-07-0.13063514E-11-0.66663492E+05 0.54481625E+02                   4
mn4oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.14123336E+01 0.10069330E+00-0.39746861E-04 0.70466522E-08-0.46758620E-12    2
-0.63416582E+05 0.50015450E+02-0.25358634E+01 0.15166311E+00-0.11900831E-03    3
 0.40779963E-07-0.20608439E-11-0.66647484E+05 0.55103424E+02                   4
mn5oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.14123336E+01 0.10069330E+00-0.39746861E-04 0.70466522E-08-0.46758620E-12    2
-0.63416582E+05 0.50015556E+02-0.25358634E+01 0.15166311E+00-0.11900831E-03    3
 0.40779963E-07-0.20608439E-11-0.66647484E+05 0.55103531E+02                   4
mn6oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.14123336E+01 0.10069330E+00-0.39746861E-04 0.70466522E-08-0.46758620E-12    2
-0.63416582E+05 0.50015816E+02-0.25358634E+01 0.15166311E+00-0.11900831E-03    3
 0.40779963E-07-0.20608439E-11-0.66647484E+05 0.55103794E+02                   4
mn7oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.14123336E+01 0.10069330E+00-0.39746861E-04 0.70466522E-08-0.46758620E-12    2
-0.63416582E+05 0.50016365E+02-0.25358634E+01 0.15166311E+00-0.11900831E-03    3
 0.40779963E-07-0.20608439E-11-0.66647484E+05 0.55104347E+02                   4
mn8oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.14123336E+01 0.10069330E+00-0.39746861E-04 0.70466522E-08-0.46758620E-12    2
-0.63688609E+05 0.50016914E+02-0.23603516E+01 0.15044452E+00-0.11607908E-03    3
 0.37855347E-07-0.10258786E-11-0.66937977E+05 0.54362602E+02                   4
mn9oo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.67228554E+02 0.11246820E-02-0.29499073E-07 0.27182336E-11-0.20407869E-15    2
-0.88938609E+05-0.32251224E+03 0.32075598E+01 0.11713555E+00-0.59280683E-04    3
 0.79274702E-08-0.66615539E-12-0.65020648E+05 0.30868755E+02                   4
mnmoo      THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.71164827E+01 0.89357942E-01-0.33779866E-04 0.58081939E-08-0.37712677E-12    2
-0.66985406E+05 0.17559807E+02-0.55892129E+01 0.15877181E+00-0.12481691E-03    3
 0.41370608E-07-0.16863465E-11-0.67269727E+05 0.69905464E+02                   4
mnmooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
 0.46966982E+01 0.96842185E-01-0.38098100E-04 0.67400192E-08-0.44665750E-12    2
-0.83891672E+05 0.32285072E+02-0.40618010E+01 0.15349548E+00-0.11070899E-03    3
 0.28313497E-07 0.25946437E-11-0.85257812E+05 0.64487320E+02                   4
mn2ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.48747662E+02 0.27740957E-01-0.67381816E-05 0.84464924E-09-0.44178870E-13    2
-0.99789250E+05-0.21570673E+03 0.64199245E+00 0.13328516E+00-0.78697551E-04    3
 0.13397644E-07 0.19137838E-11-0.83999070E+05 0.42357128E+02                   4
mn3ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.79504764E+00 0.10797986E+00-0.44085489E-04 0.80018756E-08-0.53980063E-12    2
-0.80434672E+05 0.62782440E+02-0.10749416E+01 0.14689243E+00-0.10622569E-03    3
 0.29153856E-07 0.16772835E-11-0.84629078E+05 0.49268478E+02                   4
mn4ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.96289700E+00 0.10826665E+00-0.44223543E-04 0.80281488E-08-0.54155573E-12    2
-0.80370578E+05 0.63715775E+02-0.10991639E+01 0.14702345E+00-0.10644214E-03    3
 0.29267872E-07 0.16728914E-11-0.84626000E+05 0.49376041E+02                   4
mn5ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.96289700E+00 0.10826665E+00-0.44223543E-04 0.80281488E-08-0.54155573E-12    2
-0.80370578E+05 0.63715775E+02-0.10991639E+01 0.14702345E+00-0.10644214E-03    3
 0.29267872E-07 0.16728914E-11-0.84626000E+05 0.49376041E+02                   4
mn6ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.96289700E+00 0.10826665E+00-0.44223543E-04 0.80281488E-08-0.54155573E-12    2
-0.80370578E+05 0.63715775E+02-0.10991639E+01 0.14702345E+00-0.10644214E-03    3
 0.29267872E-07 0.16728914E-11-0.84626000E+05 0.49376041E+02                   4
mn7ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.96289700E+00 0.10826665E+00-0.44223543E-04 0.80281488E-08-0.54155573E-12    2
-0.80370578E+05 0.63715775E+02-0.10991639E+01 0.14702345E+00-0.10644214E-03    3
 0.29267872E-07 0.16728914E-11-0.84626000E+05 0.49376041E+02                   4
mn8ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.96289700E+00 0.10826665E+00-0.44223543E-04 0.80281488E-08-0.54155573E-12    2
-0.80642312E+05 0.64408844E+02-0.10991639E+01 0.14702345E+00-0.10644214E-03    3
 0.29267872E-07 0.16728914E-11-0.84897742E+05 0.50069126E+02                   4
mn9ooh     THERGAS      c  10h  20o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.68059700E+02 0.19249019E-02-0.70432655E-07 0.44133564E-11-0.28747327E-15    2
-0.10696008E+06-0.32609497E+03 0.42475514E+01 0.11524761E+00-0.53328891E-04    3
 0.30250162E-08 0.72511317E-12-0.82956695E+05 0.26822044E+02                   4
mn9ooh8j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.67103783E+02 0.63241343E-03 0.58381445E-07-0.15813746E-10 0.13092470E-14    2
-0.82798156E+05-0.31830869E+03 0.30376430E+01 0.12759900E+00-0.92028786E-04    3
 0.41164423E-07-0.11977259E-10-0.59418938E+05 0.32589432E+02                   4
mn9ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.67103783E+02 0.63241343E-03 0.58381445E-07-0.15813746E-10 0.13092470E-14    2
-0.82798156E+05-0.31830869E+03 0.30376430E+01 0.12759900E+00-0.92028786E-04    3
 0.41164423E-07-0.11977259E-10-0.59418938E+05 0.32589432E+02                   4
mn9ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.67103783E+02 0.63241343E-03 0.58381445E-07-0.15813746E-10 0.13092470E-14    2
-0.82798156E+05-0.31830869E+03 0.30376430E+01 0.12759900E+00-0.92028786E-04    3
 0.41164423E-07-0.11977259E-10-0.59418938E+05 0.32589432E+02                   4
mn9ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.67103783E+02 0.63241343E-03 0.58381445E-07-0.15813746E-10 0.13092470E-14    2
-0.82798156E+05-0.31830869E+03 0.30376430E+01 0.12759900E+00-0.92028786E-04    3
 0.41164423E-07-0.11977259E-10-0.59418938E+05 0.32589432E+02                   4
mn8ooh9j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.27311788E+01 0.97907923E-01-0.38248243E-04 0.67320154E-08-0.44445253E-12    2
-0.57338371E+05 0.46763466E+02-0.17650880E+01 0.15465003E+00-0.13118332E-03    3
 0.52730584E-07-0.58458286E-11-0.60654164E+05 0.53565495E+02                   4
mn8ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57998977E+05 0.47760597E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61362574E+05 0.55735615E+02                   4
mn8ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57998977E+05 0.47760597E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61362574E+05 0.55735615E+02                   4
mn8ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57998977E+05 0.47760597E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61362574E+05 0.55735615E+02                   4
mn8ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57998977E+05 0.47760597E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61362574E+05 0.55735615E+02                   4
mn7ooh9j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.27311788E+01 0.97907923E-01-0.38248243E-04 0.67320154E-08-0.44445253E-12    2
-0.56714375E+05 0.46070381E+02-0.17650880E+01 0.15465003E+00-0.13118332E-03    3
 0.52730584E-07-0.58458286E-11-0.60030168E+05 0.52872414E+02                   4
mn7ooh8j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.22390349E+01 0.98205909E-01-0.38296468E-04 0.67301071E-08-0.44373874E-12    2
-0.57636750E+05 0.48994110E+02-0.10450486E+01 0.15046342E+00-0.12492204E-03    3
```

```
 0.48590511E-07-0.47328105E-11-0.61213516E+05 0.49853844E+02                   4
mn7ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn7ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn7ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn7ooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn6ooh9j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.27311788E+01 0.97907923E-01-0.38248243E-04 0.67320154E-08-0.44445253E-12    2
-0.56714375E+05 0.46070381E+02-0.17650880E+01 0.15465003E+00-0.13118332E-03    3
 0.52730584E-07-0.58458286E-11-0.60030168E+05 0.52872414E+02                   4
mn6ooh8j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.22390349E+01 0.98205909E-01-0.38296468E-04 0.67301071E-08-0.44373874E-12    2
-0.57636750E+05 0.48994110E+02-0.10450486E+01 0.15046342E+00-0.12492204E-03    3
 0.48590511E-07-0.47328105E-11-0.61213516E+05 0.49853844E+02                   4
mn6ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn6ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn6ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn6ooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn6ooh2j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.21677058E+01 0.99409938E-01-0.39079758E-04 0.69059327E-08-0.45706716E-12    2
-0.60909539E+05 0.46719147E+02-0.15498862E+01 0.15302317E+00-0.12713327E-03    3
 0.49362168E-07-0.48584956E-11-0.64381160E+05 0.49761181E+02                   4
mn5ooh9j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.27311788E+01 0.97907923E-01-0.38248243E-04 0.67320154E-08-0.44445253E-12    2
-0.56714375E+05 0.46070381E+02-0.17650880E+01 0.15465003E+00-0.13118332E-03    3
 0.52730584E-07-0.58458286E-11-0.60030168E+05 0.52872414E+02                   4
mn5ooh8j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.22390349E+01 0.98205909E-01-0.38296468E-04 0.67301071E-08-0.44373874E-12    2
-0.57636750E+05 0.48994110E+02-0.10450486E+01 0.15046342E+00-0.12492204E-03    3
 0.48590511E-07-0.47328105E-11-0.61213516E+05 0.49853844E+02                   4
mn5ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn5ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn5ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn5ooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn5ooh2j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.21677058E+01 0.99409938E-01-0.39079758E-04 0.69059327E-08-0.45706716E-12    2
-0.60909406E+05 0.46729767E+02-0.16246437E+01 0.15353863E+00-0.12836356E-03    3
 0.50582599E-07-0.52879537E-11-0.64373125E+05 0.50088432E+02                   4
mn4ooh8j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.22390349E+01 0.98205909E-01-0.38296468E-04 0.67301071E-08-0.44373874E-12    2
-0.57636750E+05 0.48994110E+02-0.10450486E+01 0.15046342E+00-0.12492204E-03    3
 0.48590511E-07-0.47328105E-11-0.61213516E+05 0.49853844E+02                   4
mn4ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn4ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn4ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn4ooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.26084261E+01 0.97465351E-01-0.37897189E-04 0.66451467E-08-0.43738749E-12    2
-0.57727238E+05 0.47067513E+02-0.22852726E+01 0.15921082E+00-0.14475203E-03    3
 0.67022562E-07-0.10894907E-10-0.61090840E+05 0.55042530E+02                   4
mn4ooh2j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.21677058E+01 0.99409938E-01-0.39079758E-04 0.69059327E-08-0.45706716E-12    2
-0.60909328E+05 0.46744431E+02-0.16690595E+01 0.15384799E+00-0.12910817E-03    3
 0.51326221E-07-0.55510522E-11-0.64368395E+05 0.50290764E+02                   4
mn3ooh7j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.28029697E+01 0.97138666E-01-0.37740872E-04 0.66152372E-08-0.43536070E-12    2
-0.57803520E+05 0.45981140E+02-0.21407628E+01 0.15823674E+00-0.14249078E-03    3
 0.64850688E-07-0.10157352E-10-0.61106656E+05 0.54426804E+02                   4
mn3ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.28029697E+01 0.97138666E-01-0.37740872E-04 0.66152372E-08-0.43536070E-12    2
-0.57803520E+05 0.45981140E+02-0.21407628E+01 0.15823674E+00-0.14249078E-03    3
 0.64850688E-07-0.10157352E-10-0.61106656E+05 0.54426804E+02                   4
mn3ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.28029697E+01 0.97138666E-01-0.37740872E-04 0.66152372E-08-0.43536070E-12    2
-0.57803520E+05 0.45981140E+02-0.21407628E+01 0.15823674E+00-0.14249078E-03    3
 0.64850688E-07-0.10157352E-10-0.61106656E+05 0.54426804E+02                   4
mn3ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.28029697E+01 0.97138666E-01-0.37740872E-04 0.66152372E-08-0.43536070E-12    2
-0.57803520E+05 0.45981140E+02-0.21407628E+01 0.15823674E+00-0.14249078E-03    3
 0.64850688E-07-0.10157352E-10-0.61106656E+05 0.54426804E+02                   4
mn3ooh2j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.24359453E+01 0.98953441E-01-0.38847800E-04 0.68583401E-08-0.45360658E-12    2
-0.61014812E+05 0.45268761E+02-0.19072217E+01 0.15552485E+00-0.13320445E-03    3
 0.55488716E-07-0.70511561E-11-0.64343223E+05 0.51316467E+02                   4
mn3oohmj   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.30082791E+01 0.97434029E-01-0.38005215E-04 0.66815655E-08-0.44073726E-12    2
-0.57175430E+05 0.44525520E+02-0.19378290E+01 0.15586016E+00-0.13412857E-03    3
 0.55717678E-07-0.69218910E-11-0.60364066E+05 0.53602489E+02                   4
mn2ooh6j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49154602E+02 0.23848146E-01-0.51670672E-05 0.59962718E-09-0.30027237E-13    2
-0.76117586E+05-0.21538506E+03-0.29187024E+00 0.14372450E+00-0.11281244E-03    3
 0.46969383E-07-0.91752925E-11-0.60490879E+05 0.46955143E+02                   4
mn2ooh5j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49154602E+02 0.23848146E-01-0.51670672E-05 0.59962718E-09-0.30027237E-13    2
-0.76117586E+05-0.21538506E+03-0.29187024E+00 0.14372450E+00-0.11281244E-03    3
 0.46969383E-07-0.91752925E-11-0.60490879E+05 0.46955143E+02                   4
mn2ooh4j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49331039E+02 0.23538312E-01-0.49873261E-05 0.55755384E-09-0.26599941E-13    2
-0.76188297E+05-0.21567522E+03-0.80994529E+00 0.14732899E+00-0.12149282E-03    3
 0.55649579E-07-0.12250981E-10-0.60435621E+05 0.49840599E+02                   4
mn2ooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49154602E+02 0.23848146E-01-0.51670672E-05 0.59962718E-09-0.30027237E-13    2
-0.76117586E+05-0.21538506E+03-0.29187024E+00 0.14372450E+00-0.11281244E-03    3
 0.46969383E-07-0.91752925E-11-0.60490879E+05 0.46955143E+02                   4
mn2oohmj   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49687534E+02 0.23500346E-01-0.50206336E-05 0.56780802E-09-0.27471642E-13    2
-0.75609242E+05-0.21863461E+03-0.24614564E+00 0.14245476E+00-0.10714700E-03    3
 0.40561481E-07-0.69142209E-11-0.59731715E+05 0.46794266E+02                   4
mnmooh2j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.75277967E+01 0.88698849E-01-0.33482705E-04 0.57549254E-08-0.37376233E-12    2
-0.64342898E+05 0.16877617E+02-0.48186555E+01 0.16163500E+00-0.13655193E-03    3
 0.53546646E-07-0.57510212E-11-0.64980590E+05 0.66176086E+02                   4
mnmooh3j   THERGAS      c  10h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.80318842E+01 0.86688079E-01-0.32290875E-04 0.54951088E-08-0.35423807E-12    2
-0.61194844E+05 0.16837669E+02-0.53544226E+01 0.16641657E+00-0.15076275E-03    3
 0.67784789E-07-0.10571067E-10-0.61711215E+05 0.70605423E+02                   4
mnmooh2oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.71679359E+02 0.13331774E-02-0.51367220E-07 0.66660475E-11-0.52018718E-15    2
-0.10546324E+06-0.33979773E+03 0.13464455E+00 0.14321056E+00-0.84933214E-04    3
 0.13910283E-07 0.63863059E-12-0.80167008E+05 0.50184868E+02                   4
mnmooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.60486755E+01 0.99009536E-01-0.38229362E-04 0.66725399E-08-0.43787440E-12    2
-0.78377328E+05 0.32929802E+02-0.39422626E+01 0.17040056E+00-0.13640858E-03    3
```

```
 0.43067114E-07-0.14983694E-12-0.80511742E+05 0.67439796E+02                   4
mn2oohmoo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.71679359E+02 0.13331774E-02-0.51367220E-07 0.66660475E-11-0.52018718E-15    2
-0.10546311E+06-0.34048932E+03 0.59887204E-01 0.14372602E+00-0.86163520E-04    3
 0.15130713E-07 0.20917351E-12-0.80158961E+05 0.49809914E+02                   4
mn2ooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290335E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297474E+02                   4
mn2ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290326E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297550E+02                   4
mn2ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290314E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297707E+02                   4
mn2ooh6oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348105E+06-0.33290295E+03 0.30742290E+01 0.13691708E+00-0.81163656E-04    3
 0.15438959E-07-0.50639847E-12-0.79532859E+05 0.35169743E+02                   4
mn3oohmoo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.60486755E+01 0.99009536E-01-0.38229362E-04 0.66725399E-08-0.43787440E-12    2
-0.78377188E+05 0.32238182E+02-0.40168152E+01 0.17091462E+00-0.13763554E-03    3
 0.44284238E-07-0.57813259E-12-0.80503727E+05 0.67063957E+02                   4
mn3ooh2oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290314E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297684E+02                   4
mn3ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782814E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722973E+02                   4
mn3ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782967E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51723129E+02                   4
mn3ooh6oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883422E+05 0.63783775E+02-0.94203681E+00 0.16367814E+00-0.13157752E-03    3
 0.43506734E-07-0.90918093E-12-0.79884047E+05 0.52168697E+02                   4
mn3ooh7oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883477E+05 0.63784218E+02-0.91189986E+00 0.16347344E+00-0.13109515E-03    3
 0.43033225E-07-0.74398219E-12-0.79887336E+05 0.52041012E+02                   4
mn4ooh2oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290314E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297684E+02                   4
mn4ooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782799E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722958E+02                   4
mn4ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782982E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51723145E+02                   4
mn4ooh6oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883422E+05 0.63783791E+02-0.94203681E+00 0.16367814E+00-0.13157752E-03    3
 0.43506734E-07-0.90918093E-12-0.79884047E+05 0.52168713E+02                   4
mn4ooh7oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883477E+05 0.63784233E+02-0.91189986E+00 0.16347344E+00-0.13109515E-03    3
 0.43033225E-07-0.74398219E-12-0.79887336E+05 0.52041027E+02                   4
mn4ooh8oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155094E+05 0.63785957E+02-0.98645282E+00 0.16398752E+00-0.13232212E-03    3
 0.44250353E-07-0.11722807E-11-0.80151062E+05 0.52358513E+02                   4
mn5ooh2oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290314E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297684E+02                   4
mn5ooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782799E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722958E+02                   4
mn5ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782753E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722904E+02                   4
mn5ooh6oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883422E+05 0.63783791E+02-0.94203681E+00 0.16367814E+00-0.13157752E-03    3
 0.43506734E-07-0.90918093E-12-0.79884047E+05 0.52168713E+02                   4
mn5ooh7oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883477E+05 0.63784233E+02-0.91189986E+00 0.16347344E+00-0.13109515E-03    3
 0.43033225E-07-0.74398219E-12-0.79887336E+05 0.52041027E+02                   4
mn5ooh8oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155094E+05 0.63785957E+02-0.98645282E+00 0.16398752E+00-0.13232212E-03    3
 0.44250353E-07-0.11722807E-11-0.80151062E+05 0.52358513E+02                   4
mn5ooh9oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426906E+05 0.40430847E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647055E+05 0.50670567E+02                   4
mn6ooh2oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.70555351E+02 0.33619984E-02-0.15774897E-06 0.44452241E-11-0.47129850E-16    2
-0.10348100E+06-0.33290314E+03 0.30440919E+01 0.13712178E+00-0.81646031E-04    3
 0.15912466E-07-0.67159727E-12-0.79529570E+05 0.35297684E+02                   4
mn6ooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782799E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722958E+02                   4
mn6ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782753E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722904E+02                   4
mn6ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782753E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722904E+02                   4
mn6ooh7oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883477E+05 0.63784233E+02-0.91189986E+00 0.16347344E+00-0.13109515E-03    3
 0.43033225E-07-0.74398219E-12-0.79887336E+05 0.52041027E+02                   4
mn6ooh8oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155094E+05 0.63785957E+02-0.98645282E+00 0.16398752E+00-0.13232212E-03    3
 0.44250353E-07-0.11722807E-11-0.80151062E+05 0.52358513E+02                   4
mn6ooh9oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426906E+05 0.40431015E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647055E+05 0.50670734E+02                   4
mn7ooh3oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782799E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722958E+02                   4
mn7ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782753E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722904E+02                   4
mn7ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782753E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722904E+02                   4
mn7ooh6oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.74883617E+05 0.63782799E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.79895375E+05 0.51722958E+02                   4
mn7ooh8oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155094E+05 0.63785957E+02-0.98645282E+00 0.16398752E+00-0.13232212E-03    3
 0.44250353E-07-0.11722807E-11-0.80151062E+05 0.52358513E+02                   4
mn7ooh9oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426914E+05 0.40431244E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647062E+05 0.50670956E+02                   4
mn8ooh4oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155359E+05 0.64475822E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.80167125E+05 0.52415974E+02                   4
mn8ooh5oo  THERGAS      c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155359E+05 0.63782738E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
```

```
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.80167125E+05 0.51722889E+02                   4
mn8ooh6oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155359E+05 0.63782784E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.80167125E+05 0.51722942E+02                   4
mn8ooh7oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.50039178E+00 0.11016469E+00-0.44172157E-04 0.79171301E-08-0.52937212E-12    2
-0.75155359E+05 0.63782921E+02-0.83714253E+00 0.16295797E+00-0.12986484E-03    3
 0.41812793E-07-0.31452523E-12-0.80167125E+05 0.51723076E+02                   4
mn8ooh9oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426914E+05 0.40431534E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647062E+05 0.50671249E+02                   4
mn9ooh5oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426906E+05 0.39737808E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647055E+05 0.49977520E+02                   4
mn9ooh6oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426906E+05 0.39737854E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647055E+05 0.49977573E+02                   4
mn9ooh7oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426906E+05 0.39737991E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647055E+05 0.49977707E+02                   4
mn9ooh8oo  THERGAS       c  10h  19o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.49032345E+01 0.10208865E+00-0.39954459E-04 0.70385027E-08-0.46482219E-12    2
-0.74426914E+05 0.39738235E+02-0.22009850E+00 0.15776737E+00-0.12120150E-03    3
 0.36449613E-07 0.70364759E-12-0.77647062E+05 0.49977951E+02                   4
mn2d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.20070074E+01 0.88490829E-01-0.35104946E-04 0.62436660E-08-0.41514177E-12    2
-0.56158578E+05 0.38769318E+02-0.17668152E+01 0.12243804E+00-0.81729173E-04    3
 0.20630919E-07 0.15473402E-11-0.57806266E+05 0.48916496E+02                   4
mn3d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.59882706E+02-0.10326732E-01 0.12670993E-04-0.33278702E-08 0.27739348E-12    2
-0.79148531E+05-0.28316534E+03 0.97755998E+00 0.90207055E-01-0.27604186E-04    3
-0.61995236E-08 0.21856553E-11-0.56748957E+05 0.43820946E+02                   4
mn4d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.38035502E+01 0.86741202E-01-0.34441149E-04 0.61297243E-08-0.40777651E-12    2
-0.56599418E+05 0.28195648E+02-0.21904101E+01 0.12607017E+00-0.85545209E-04    3
 0.22006279E-07 0.13865033E-11-0.57563250E+05 0.50082764E+02                   4
mn5d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.38035502E+01 0.86741202E-01-0.34441149E-04 0.61297243E-08-0.40777651E-12    2
-0.56599418E+05 0.28195641E+02-0.21904101E+01 0.12607017E+00-0.85545209E-04    3
 0.22006279E-07 0.13865033E-11-0.57563250E+05 0.50082756E+02                   4
mn6d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.38035502E+01 0.86741202E-01-0.34441149E-04 0.61297243E-08-0.40777651E-12    2
-0.56599418E+05 0.28195641E+02-0.21904101E+01 0.12607017E+00-0.85545209E-04    3
 0.22006279E-07 0.13865033E-11-0.57563250E+05 0.50082756E+02                   4
mn7d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.13300382E+02 0.70530586E-01-0.26310932E-04 0.44829966E-08-0.28928772E-12    2
-0.60291312E+05-0.24629242E+02-0.20379421E+00 0.11693568E+00-0.71680290E-04    3
 0.13886917E-07 0.27124913E-11-0.57817898E+05 0.41048805E+02                   4
mn8d       THERGAS       c  10h  18o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.12676240E+01 0.91367513E-01-0.36858331E-04 0.66335346E-08-0.44479072E-12    2
-0.54122703E+05 0.42924500E+02-0.21046453E+01 0.12710734E+00-0.87379907E-04    3
 0.22720943E-07 0.15095314E-11-0.56192543E+05 0.49889233E+02                   4
mnmo       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.47420316E+01 0.89243628E-01-0.33870263E-04 0.58399592E-08-0.37993187E-12    2
-0.66144102E+05 0.26923096E+02-0.69038072E+01 0.15414707E+00-0.11958471E-03    3
 0.39442487E-07-0.16041560E-11-0.66534289E+05 0.74428688E+02                   4
mn2o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.45991638E+02 0.25594521E-01-0.58486139E-05 0.70252321E-09-0.35799414E-13    2
-0.79976266E+05-0.20504913E+03-0.20275309E+01 0.13264129E+00-0.84169878E-04    3
 0.20798957E-07-0.84329679E-12-0.64235996E+05 0.52272465E+02                   4
mn3o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.86799973E+00 0.10043255E+00-0.39768838E-04 0.70647759E-08-0.46938462E-12    2
-0.61559406E+05 0.58843323E+02-0.36067841E+01 0.14535506E+00-0.10975153E-03    3
 0.34855010E-07-0.57157588E-12-0.64881430E+05 0.58593155E+02                   4
mn4o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.10133047E+01 0.10067739E+00-0.39888084E-04 0.70880080E-08-0.47098463E-12    2
-0.61502156E+05 0.59654991E+02-0.37271669E+01 0.14617780E+00-0.11169137E-03    3
 0.36749192E-07-0.12257710E-11-0.64868414E+05 0.59104542E+02                   4
mn5o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.10133047E+01 0.10067739E+00-0.39888084E-04 0.70880080E-08-0.47098463E-12    2
-0.61502156E+05 0.59655113E+02-0.37271669E+01 0.14617780E+00-0.11169137E-03    3
 0.36749192E-07-0.12257710E-11-0.64868414E+05 0.59104664E+02                   4
mn6o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
-0.10133047E+01 0.10067739E+00-0.39888084E-04 0.70880080E-08-0.47098463E-12    2
-0.61502188E+05 0.59655327E+02-0.37120984E+01 0.14607544E+00-0.11145019E-03    3
 0.36512436E-07-0.11431716E-11-0.64870059E+05 0.59040825E+02                   4
mn7o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.10133047E+01 0.10067739E+00-0.39888084E-04 0.70880080E-08-0.47098463E-12    2
-0.61502211E+05 0.59655907E+02-0.36970298E+01 0.14597310E+00-0.11120900E-03    3
 0.36275683E-07-0.10605722E-11-0.64871707E+05 0.58977329E+02                   4
mn8o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.10133047E+01 0.10067739E+00-0.39888084E-04 0.70880080E-08-0.47098463E-12    2
-0.61773820E+05 0.59657906E+02-0.37716851E+01 0.14648786E+00-0.11243764E-03    3
 0.37494466E-07-0.14894517E-11-0.65135414E+05 0.59295555E+02                   4
mn9o       THERGAS       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.64490761E+02 0.13289681E-02-0.51988106E-07 0.64831088E-11-0.49751682E-15    2
-0.87910562E+05-0.31098438E+03 0.17654381E+01 0.11330011E+00-0.55655546E-04    3
 0.72663737E-08-0.90475083E-12-0.64270410E+05 0.35943542E+02                   4
mncy9o7    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 3.70484643e+01 4.18260572e-02-1.43554163e-05 2.23628345e-09-1.30119854e-13    2
-8.40286575e+04-1.63524954e+02-1.84646712e+00 1.29795002e-01-8.96705496e-05    3
 3.13754362e-08-4.44720544e-12-7.02385178e+04 4.63847013e+01                   4
mncy9o6    THERGAS       c  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.26879005E+02 0.14055641E+00-0.65429478E-04 0.13032690E-07-0.94010639E-12    2
-0.64983219E+05 0.19325323E+03-0.40082297E+01 0.13794762E+00-0.10604705E-03    3
 0.28590790E-07 0.34406842E-11-0.77776094E+05 0.51903866E+02                   4
mncy9o5    THERGAS       c  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.25222651E+02 0.14662971E+00-0.67158166E-04 0.13221571E-07-0.94554497E-12    2
-0.70992648E+05 0.18390302E+03-0.49027219E+01 0.15450636E+00-0.12429067E-03    3
 0.41135984E-07-0.30302098E-12-0.83313836E+05 0.54762093E+02                   4
mncy8o6    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.76041866e+01 4.12523138e-02-1.40984366e-05 2.19047487e-09-1.27248297e-13    2
-8.63356461e+04-1.66812377e+02-2.46439521e+00 1.34506137e-01-9.70896022e-05    3
 3.58913640e-08-5.40727859e-12-7.24058975e+04 4.84754736e+01                   4
mncy8o5    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
-0.29124466E+02 0.15438461E+00-0.71639355E-04 0.14236839E-07-0.10252123E-11    2
-0.69288312E+05 0.20691962E+03-0.48572984E+01 0.15515757E+00-0.12219927E-03    3
 0.35922429E-07 0.23652671E-11-0.83188141E+05 0.55718807E+02                   4
mncy8o4    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    61
-0.29124466E+02 0.15438461E+00-0.71639355E-04 0.14236839E-07-0.10252123E-11    2
-0.72005711E+05 0.20420221E+03-0.48572984E+01 0.15515757E+00-0.12219927E-03    3
 0.35922429E-07 0.23652671E-11-0.85905547E+05 0.53001400E+02                   4
mncy7o5    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.76041866e+01 4.12523138e-02-1.40984366e-05 2.19047487e-09-1.27248297e-13    2
-8.63356461e+04-1.66812377e+02-2.46439521e+00 1.34506137e-01-9.70896022e-05    3
 3.58913640e-08-5.40727859e-12-7.24058975e+04 4.84754736e+01                   4
mncy7o4    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 3.70567860e+01 4.20354090e-02-1.43497750e-05 2.22847827e-09-1.29431593e-13    2
-9.64580081e+04-1.65306773e+02-4.33581260e+00 1.38248106e-01-9.96692147e-05    3
 3.66591348e-08-5.47652536e-12-8.20734706e+04 5.71087558e+01                   4
mncy7o3    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.70910428e+01 4.30203851e-02-1.47055033e-05 2.28343304e-09-1.32582535e-13    2
-9.87594844e+04-1.70702139e+02-5.00343622e+00 1.40695406e-01-1.01105938e-04    3
 3.70365323e-08-5.50863451e-12-8.41151663e+04 5.55429768e+01                   4
mncy6o4    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.76041866e+01 4.12523138e-02-1.40984366e-05 2.19047487e-09-1.27248297e-13    2
-8.63356461e+04-1.66812377e+02-2.46439521e+00 1.34506137e-01-9.70896022e-05    3
 3.58913640e-08-5.40727859e-12-7.24058975e+04 4.84754736e+01                   4
mncy6o3    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 3.70567860e+01 4.20354090e-02-1.43497750e-05 2.22847827e-09-1.29431593e-13    2
-9.64580081e+04-1.65306773e+02-4.33581260e+00 1.38248106e-01-9.96692147e-05    3
 3.66591348e-08-5.47652536e-12-8.20734706e+04 5.71087558e+01                   4
mncy6o2    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    61
 3.80415706e+01 4.21953406e-02-1.45285288e-05 2.26827930e-09-1.32202553e-13    2
-9.86005814e+04-1.76739173e+02-6.88473371e+00 1.46740864e-01-1.07078410e-04    3
 3.94176767e-08-5.84905405e-12-8.30349290e+04 6.45635747e+01                   4
mncy5o3    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.76041866e+01 4.12523138e-02-1.40984366e-05 2.19047487e-09-1.27248297e-13    2
-8.63356461e+04-1.66812377e+02-2.46439521e+00 1.34506137e-01-9.70896022e-05    3
 3.58913640e-08-5.40727859e-12-7.24058975e+04 4.84754736e+01                   4
mncy5o2    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    71
 3.80087675e+01 4.12087307e-02-1.41722567e-05 2.21324264e-09-1.29046956e-13    2
-9.62994424e+04-1.71351624e+02-6.21803930e+00 1.44302375e-01-1.05656336e-04    3
 3.90493134e-08-5.81888711e-12-8.09932354e+04 6.61325961e+01                   4
mncy4o2    2/21/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.85589373e+01 4.04213526e-02-1.39191382e-05 2.17493524e-09-1.26845022e-13    2
-8.61772602e+04-1.72871032e+02-4.34964803e+00 1.40586966e-01-1.03123172e-04    3
 3.83111599e-08-5.75612143e-12-7.13255857e+04 5.75104526e+01                   4
mncy2om    2/22/ 7 thermc  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1380.000    71
 3.95652458e+01 3.93645163e-02-1.39174571e-05 2.21665502e-09-1.30920368e-13    2
-9.83571079e+04-1.80842463e+02-3.81374028e+00 1.33690816e-01-8.94486984e-05    3
```

```
 2.85205738e-08-3.46108467e-12-8.26603663e+04 5.45077117e+01                   4
mn8ooh9*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.39283590E+01 0.11254792E+00-0.47270321E-04 0.87524077E-08-0.59883988E-12    2
-0.88264125E+05 0.84982239E+02-0.53569317E+00 0.14643513E+00-0.10811644E-03    3
 0.29249138E-07 0.22985132E-11-0.94022008E+05 0.50525806E+02                   4
mn7ooh9*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.77983227E+01 0.11870608E+00-0.50421775E-04 0.94121617E-08-0.64782619E-12    2
-0.87371156E+05 0.10634687E+03 0.66645306E+00 0.14331399E+00-0.10645275E-03    3
 0.29179743E-07 0.23562339E-11-0.95005594E+05 0.43941647E+02                   4
mn6ooh9*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.77983227E+01 0.11870608E+00-0.50421775E-04 0.94121617E-08-0.64782619E-12    2
-0.87371156E+05 0.10634687E+03 0.66645306E+00 0.14331399E+00-0.10645275E-03    3
 0.29179743E-07 0.23562339E-11-0.95005594E+05 0.43941647E+02                   4
mn5ooh9*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.77983227E+01 0.11870608E+00-0.50421775E-04 0.94121617E-08-0.64782619E-12    2
-0.87371156E+05 0.10634687E+03 0.66645306E+00 0.14331399E+00-0.10645275E-03    3
 0.29179743E-07 0.23562339E-11-0.95005594E+05 0.43941647E+02                   4
mn9ooh8*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.75182762E+01 0.11728982E+00-0.49473027E-04 0.91865653E-08-0.62976257E-12    2
-0.88391359E+05 0.10481673E+03 0.15441039E+01 0.13819808E+00-0.10074367E-03    3
 0.27408362E-07 0.22613111E-11-0.95951320E+05 0.40146374E+02                   4
mn7ooh8*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.25547786E+01 0.10996458E+00-0.45874112E-04 0.84532328E-08-0.57637819E-12    2
-0.92492273E+05 0.76035637E+02-0.78257298E+00 0.14577375E+00-0.10676541E-03    3
 0.28949486E-07 0.20748314E-11-0.97526266E+05 0.50935268E+02                   4
mn6ooh8*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.62929797E+01 0.11587533E+00-0.48872505E-04 0.90756913E-08-0.62225252E-12    2
-0.91649594E+05 0.97365891E+02 0.38995332E+00 0.14286086E+00-0.10560882E-03    3
 0.29393176E-07 0.19486036E-11-0.98506727E+05 0.45169239E+02                   4
mn5ooh8*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.62929797E+01 0.11587533E+00-0.48872505E-04 0.90756913E-08-0.62225252E-12    2
-0.91649594E+05 0.97365891E+02 0.38995332E+00 0.14286086E+00-0.10560882E-03    3
 0.29393176E-07 0.19486036E-11-0.98506727E+05 0.45169239E+02                   4
mn4ooh8*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.62929797E+01 0.11587533E+00-0.48872505E-04 0.90756913E-08-0.62225252E-12    2
-0.91649594E+05 0.97365891E+02 0.38995332E+00 0.14286086E+00-0.10560882E-03    3
 0.29393176E-07 0.19486036E-11-0.98506727E+05 0.45169239E+02                   4
mn9ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15085877E+02 0.13060108E+00-0.56561326E-04 0.10699904E-07-0.74332554E-12    2
-0.86091594E+05 0.14706750E+03 0.35427830E+00 0.14351138E+00-0.10836920E-03    3
 0.31121314E-07 0.20493021E-11-0.96381492E+05 0.45899017E+02                   4
mn8ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15166872E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.54501663E+02                   4
mn6ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn5ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn4ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn3ooh7*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn9ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15085877E+02 0.13060108E+00-0.56561326E-04 0.10699904E-07-0.74332554E-12    2
-0.86091594E+05 0.14706750E+03 0.35427830E+00 0.14351138E+00-0.10836920E-03    3
 0.31121314E-07 0.20493021E-11-0.96381492E+05 0.45899017E+02                   4
mn8ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86811039E+05 0.17258037E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98944047E+05 0.46653160E+02                   4
mn7ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn5ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn4ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
```

```
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn3ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn2ooh6*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn9ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15085877E+02 0.13060108E+00-0.56561326E-04 0.10699904E-07-0.74332554E-12    2
-0.86091594E+05 0.14706750E+03 0.35427830E+00 0.14351138E+00-0.10836920E-03    3
 0.31121314E-07 0.20493021E-11-0.96381492E+05 0.45899017E+02                   4
mn8ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86811039E+05 0.17258037E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98944047E+05 0.46653160E+02                   4
mn7ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn6ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn4ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn3ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19658485E+02 0.13932769E+00-0.61401188E-04 0.11760376E-07-0.82436770E-12    2
-0.86539305E+05 0.17188728E+03 0.13515376E+00 0.14593577E+00-0.11037255E-03    3
 0.29822552E-07 0.33934858E-11-0.98672320E+05 0.45960075E+02                   4
mn2ooh5*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn8ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19941429E+02 0.13983284E+00-0.61677281E-04 0.11820776E-07-0.82899562E-12    2
-0.86702703E+05 0.17414938E+03-0.31791240E-01 0.14707474E+00-0.11305166E-03    3
 0.32431089E-07 0.24953609E-11-0.98925953E+05 0.47362583E+02                   4
mn7ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19941429E+02 0.13983284E+00-0.61677281E-04 0.11820776E-07-0.82899562E-12    2
-0.86430969E+05 0.17345630E+03-0.31791240E-01 0.14707474E+00-0.11305166E-03    3
 0.32431089E-07 0.24953609E-11-0.98654219E+05 0.46669498E+02                   4
mn6ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.19941429E+02 0.13983284E+00-0.61677281E-04 0.11820776E-07-0.82899562E-12    2
-0.86430953E+05 0.17345630E+03-0.31791240E-01 0.14707474E+00-0.11305166E-03    3
 0.32431089E-07 0.24953609E-11-0.98654203E+05 0.46669498E+02                   4
mn5ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn3ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn2ooh4*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.15986936E+02 0.13344435E+00-0.58356753E-04 0.11117448E-07-0.77634383E-12    2
-0.87338812E+05 0.15097563E+03-0.15292650E+01 0.15226519E+00-0.11974721E-03    3
 0.37592098E-07 0.60968277E-12-0.97639289E+05 0.53808582E+02                   4
mn7ooh3*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.18239710E+02 0.13715252E+00-0.60300208E-04 0.11531088E-07-0.80741121E-12    2
-0.88530195E+05 0.16397057E+03-0.21767592E+01 0.14923331E+00-0.10927139E-03    3
 0.26886999E-07 0.43822008E-11-0.99186719E+05 0.59000393E+02                   4
mn6ooh3*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.18239710E+02 0.13715252E+00-0.60300208E-04 0.11531088E-07-0.80741121E-12    2
-0.88530195E+05 0.16397057E+03-0.21767592E+01 0.14923331E+00-0.10927139E-03    3
 0.26886999E-07 0.43822008E-11-0.99186719E+05 0.59000393E+02                   4
mn5ooh3*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.18239538E+02 0.13715157E+00-0.60302649E-04 0.11532387E-07-0.80756718E-12    2
-0.88528875E+05 0.16397250E+03-0.24576032E+01 0.15118340E+00-0.11396000E-03    3
 0.31570650E-07 0.27233912E-11-0.99156703E+05 0.60189434E+02                   4
mn4ooh3*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
```

```
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn2ooh3*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn6ooh2*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn5ooh2*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn4ooh2*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn3ooh2*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mnmooh2*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
-0.14523026E+02 0.13119398E+00-0.57220917E-04 0.10881816E-07-0.75898408E-12    2
-0.89347703E+05 0.14280591E+03-0.36103296E+01 0.15397950E+00-0.11488867E-03    3
 0.30951689E-07 0.28940982E-11-0.98178656E+05 0.65868797E+02                   4
mn2oohm*o  THERGAS       c  10h  18o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000    01
 0.15096485E+02 0.80422774E-01-0.30867508E-04 0.53665272E-08-0.35128037E-12    2
-0.96481172E+05-0.22328690E+02 0.14030970E+01 0.13515638E+00-0.90302558E-04    3
 0.21096108E-07 0.22374210E-11-0.94793039E+05 0.41355442E+02                   4
mn8dmj     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    91
 3.39210432e+01 3.93517781e-02-1.34212437e-05 2.07886991e-09-1.20447709e-13    2
-4.31199570e+04-1.42084070e+02 2.42098349e+00 1.09451571e-01-7.25388320e-05    3
 2.46898906e-08-3.45173809e-12-3.17769778e+04 2.84229756e+01                   4
mn8d2j     2/15/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.47070082e+01 3.91526246e-02-1.33073300e-05 2.05642216e-09-1.18972361e-13    2
-4.69290381e+04-1.48448832e+02 1.28590502e+00 1.16314131e-01-8.16833825e-05    3
 2.98548331e-08-4.50569889e-12-3.51953902e+04 3.14304727e+01                   4
mn8d3j     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    91
 3.38446075e+01 3.88220183e-02-1.35325741e-05 2.13003009e-09-1.24737860e-13    2
-4.47541159e+04-1.41615488e+02 3.28431397e+00 1.00169811e-01-5.69987541e-05    3
 1.44774197e-08-1.16407046e-12-3.30736972e+04 2.61847905e+01                   4
mn8d4j     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    91
 3.38446075e+01 3.88220183e-02-1.35325741e-05 2.13003009e-09-1.24737860e-13    2
-4.47541159e+04-1.41615488e+02 3.28431397e+00 1.00169811e-01-5.69987541e-05    3
 1.44774197e-08-1.16407046e-12-3.30736972e+04 2.61847905e+01                   4
mn8d5j     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    91
 3.38446075e+01 3.88220183e-02-1.35325741e-05 2.13003009e-09-1.24737860e-13    2
-4.47541159e+04-1.41615488e+02 3.28431397e+00 1.00169811e-01-5.69987541e-05    3
 1.44774197e-08-1.16407046e-12-3.30736972e+04 2.61847905e+01                   4
mn8d6j     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1377.000    91
 3.38446075e+01 3.88220183e-02-1.35325741e-05 2.13003009e-09-1.24737860e-13    2
-4.47541159e+04-1.41615488e+02 3.28431397e+00 1.00169811e-01-5.69987541e-05    3
 1.44774197e-08-1.16407046e-12-3.30736972e+04 2.61847905e+01                   4
mn8d7j     2/ 9/ 7       c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    81
 3.39724608e+01 3.97568836e-02-1.35829022e-05 2.10663989e-09-1.22169121e-13    2
-5.00559341e+04-1.46463402e+02 1.33851022e+00 1.12254886e-01-7.44373832e-05    3
 2.51816890e-08-3.47750641e-12-3.83068581e+04 3.02011354e+01                   4
mn8oh9j    2/23/ 7       c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1385.000    11
 3.78901189e+01 4.23642998e-02-1.44285907e-05 2.23437702e-09-1.29460116e-13    2
-8.02363773e+04-1.60543337e+02 2.73294723e+00 1.22136480e-01-8.35812285e-05    3
 2.96458710e-08-4.34243857e-12-6.77356442e+04 2.92056072e+01                   4
mn7oh8j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10365763E+02 0.96658662E-01-0.41725994E-04 0.78767917E-08-0.54644543E-12    2
-0.69141852E+05 0.10711480E+03-0.35745937E+00 0.10660749E+00-0.77554687E-04    3
 0.21395978E-07 0.16336575E-11-0.75997492E+05 0.40893982E+02                   4
mn6oh7j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50156061E-01 0.97817689E-01-0.38246792E-04 0.67355312E-08-0.44483696E-12    2
-0.64935121E+05 0.57994720E+02-0.33847890E+01 0.15303026E+00-0.13611288E-03    3
 0.61967100E-07-0.97730496E-11-0.68526992E+05 0.58671562E+02                   4
mn5oh6j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10365763E+02 0.96658662E-01-0.41725994E-04 0.78767917E-08-0.54644543E-12    2
-0.69141852E+05 0.10711480E+03-0.35745937E+00 0.10660749E+00-0.77554687E-04    3
 0.21395978E-07 0.16336575E-11-0.75997492E+05 0.40893982E+02                   4
mn4oh5j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.50156061E-01 0.97817689E-01-0.38246792E-04 0.67355312E-08-0.44483696E-12    2
-0.64935121E+05 0.57994720E+02-0.33847890E+01 0.15303026E+00-0.13611288E-03    3
 0.61967100E-07-0.97730496E-11-0.68526992E+05 0.58671562E+02                   4
mn3oh4j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
```

```
-0.50156061E-01 0.97817689E-01-0.38246792E-04 0.67355312E-08-0.44483696E-12    2
-0.64935121E+05 0.57994720E+02-0.33847890E+01 0.15303026E+00-0.13611288E-03    3
 0.61967100E-07-0.97730496E-11-0.68526992E+05 0.58671562E+02                   4
mn2oh3j    09/04/09      c  10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46207794E+02 0.24403315E-01-0.53682579E-05 0.62552025E-09-0.31163308E-13    2
-0.83173570E+05-0.20272263E+03-0.19655590E+01 0.14145157E+00-0.11332287E-03    3
 0.50763070E-07-0.11076741E-10-0.67864750E+05 0.53025036E+02                   4
mn8oh9oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.22776420E+01 0.99019937E-01-0.38847509E-04 0.68549979E-08-0.45323063E-12    2
-0.90832812E+05 0.38235794E+02-0.15790669E+01 0.14446001E+00-0.10392295E-03    3
 0.27829786E-07 0.19549063E-11-0.93729648E+05 0.44381008E+02                   4
mn7oh8oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20335941E+01 0.10695178E+00-0.43003773E-04 0.77234272E-08-0.51719658E-12    2
-0.91599000E+05 0.61763992E+02-0.20277374E+01 0.14848147E+00-0.10978090E-03    3
 0.30402823E-07 0.19186976E-11-0.96267688E+05 0.45413647E+02                   4
mn6oh7oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19572169E+01 0.10682118E+00-0.42940188E-04 0.77111020E-08-0.51635378E-12    2
-0.91356703E+05 0.61338753E+02-0.19375579E+01 0.14787328E+00-0.10836562E-03    3
 0.29037457E-07 0.23852411E-11-0.96005844E+05 0.45029396E+02                   4
mn5oh6oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19572169E+01 0.10682118E+00-0.42940188E-04 0.77111020E-08-0.51635378E-12    2
-0.91356703E+05 0.61338753E+02-0.19375579E+01 0.14787328E+00-0.10836562E-03    3
 0.29037457E-07 0.23852411E-11-0.96005844E+05 0.45029396E+02                   4
mn4oh5oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19572169E+01 0.10682118E+00-0.42940188E-04 0.77111020E-08-0.51635378E-12    2
-0.91356703E+05 0.61338753E+02-0.19375579E+01 0.14787328E+00-0.10836562E-03    3
 0.29037457E-07 0.23852411E-11-0.96005844E+05 0.45029396E+02                   4
mn3oh4oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19572169E+01 0.10682118E+00-0.42940188E-04 0.77111020E-08-0.51635378E-12    2
-0.91356703E+05 0.61338753E+02-0.19375579E+01 0.14787328E+00-0.10836562E-03    3
 0.29037457E-07 0.23852411E-11-0.96005844E+05 0.45029396E+02                   4
mn2oh3oo   09/04/09      c  10h  19o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.65587036E+02 0.35945803E-02-0.16633071E-06 0.49897884E-12 0.36750915E-15    2
-0.11886902E+06-0.32102618E+03 0.15650396E+01 0.12438867E+00-0.64918800E-04    3
 0.68268351E-08 0.11498634E-11-0.95596398E+05 0.30241404E+02                   4
mnm*o      09/04/09      c  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.24914291E+02 0.51828083E-01-0.17464004E-04 0.27713112E-08-0.17028595E-12    2
-0.61656535E+05-0.95595734E+02 0.45235163E+00 0.11426294E+00-0.67648107E-04    3
 0.13068645E-07 0.17140083E-11-0.54635180E+05 0.32135048E+02                   4
mnmj*o     09/04/09      c  10h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.25989895E+02 0.46972632E-01-0.14900670E-04 0.22674083E-08-0.13545619E-12    2
-0.44214695E+05-0.10238121E+03 0.48557711E+00 0.10985116E+00-0.61936262E-04    3
 0.88167740E-08 0.29546767E-11-0.36726477E+05 0.31479998E+02                   4
mn8d7j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15086407E+02 0.63818470E-01-0.22515316E-04 0.36871668E-08-0.23137362E-12    2
-0.45354348E+05-0.34106796E+02 0.23662057E-01 0.11683032E+00-0.81864368E-04    3
 0.27240183E-07-0.24186590E-11-0.42465309E+05 0.39301453E+02                   4
mn7d6j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23479391E+02 0.28579960E-01-0.76853730E-05 0.10364974E-08-0.56903321E-13    2
-0.11470270E+05-0.10275906E+03-0.10364834E+01 0.84920399E-01-0.49339262E-04    3
 0.10445531E-07 0.35589123E-12-0.36748013E+04 0.27837570E+02                   4
mn7d2j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15728065E+02 0.63326798E-01-0.22393964E-04 0.36784931E-08-0.23159347E-12    2
-0.40618078E+05-0.37966652E+02-0.12970437E+01 0.12736797E+00-0.10297355E-03    3
 0.44523961E-07-0.75374429E-11-0.37503895E+05 0.44098564E+02                   4
mn6d5j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.58661723E+01 0.79291508E-01-0.30059171E-04 0.51801274E-08-0.33695461E-12    2
-0.41729598E+05 0.17262108E+02-0.16768045E+01 0.12403274E+00-0.91166090E-04    3
 0.30861877E-07-0.21690061E-11-0.42242289E+05 0.47076797E+02                   4
mn6d2j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67307177E+01 0.78399345E-01-0.29700392E-04 0.51150795E-08-0.33253798E-12    2
-0.37083031E+05 0.12197517E+02-0.28038538E+01 0.13317759E+00-0.10886070E-03    3
 0.44690349E-07-0.60525578E-11-0.37300625E+05 0.51100155E+02                   4
mn5d4j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.59340067E+01 0.79170987E-01-0.29988394E-04 0.51633786E-08-0.33557732E-12    2
-0.41756668E+05 0.16895866E+02-0.15808147E+01 0.12338778E+00-0.89643814E-04    3
 0.29360150E-07-0.16421475E-11-0.42252980E+05 0.46678383E+02                   4
mn5d2j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67307177E+01 0.78399345E-01-0.29700392E-04 0.51150795E-08-0.33253798E-12    2
-0.37083031E+05 0.12197525E+02-0.28038538E+01 0.13317759E+00-0.10886070E-03    3
 0.44690349E-07-0.60525578E-11-0.37300625E+05 0.51100163E+02                   4
mn4d3j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.58707910E+01 0.79283506E-01-0.30054460E-04 0.51790003E-08-0.33686045E-12    2
-0.41730965E+05 0.17296074E+02-0.16964527E+01 0.12419408E+00-0.91578862E-04    3
 0.31285779E-07-0.23210774E-11-0.42240727E+05 0.47214161E+02                   4
mn4d2j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67307177E+01 0.78399345E-01-0.29700392E-04 0.51150795E-08-0.33253798E-12    2
-0.37083031E+05 0.12197525E+02-0.28038538E+01 0.13317759E+00-0.10886070E-03    3
```

```
 0.44690349E-07-0.60525578E-11-0.37300625E+05 0.51100163E+02                   4
mn3d2j     09/04/09      c  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.37307121E+05 0.70547783E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.37307121E+05 0.70547783E+02                   4
c8h17-1    1/24/ 7 thermc   8h  17    0    0g   300.000  5000.000 1382.000    61
 2.60183855e+01 3.57121517e-02-1.20292426e-05 1.85288176e-09-1.07034975e-13    2
-1.37623767e+04-1.06326391e+02-5.45387838e-01 9.23919620e-02-5.66222636e-05    3
 1.71716917e-08-2.03495438e-12-3.96985038e+03 3.82971150e+01                   4
c8h17-2    1/24/ 7 thermc   8h  17    0    0g   300.000  5000.000 1377.000    71
 2.58030848e+01 3.59554256e-02-1.22940500e-05 1.91163268e-09-1.11092373e-13    2
-1.52199366e+04-1.06762154e+02 1.32658093e-01 8.64671209e-02-4.65433984e-05    3
 1.06335613e-08-5.88247411e-13-5.31914645e+03 3.45289960e+01                   4
c8h17-3    1/24/ 7 thermc   8h  17    0    0g   300.000  5000.000 1377.000    71
 2.58030848e+01 3.59554256e-02-1.22940500e-05 1.91163268e-09-1.11092373e-13    2
-1.52199366e+04-1.06762154e+02 1.32658093e-01 8.64671209e-02-4.65433984e-05    3
 1.06335613e-08-5.88247411e-13-5.31914645e+03 3.45289960e+01                   4
c8h17-4    1/24/ 7 thermc   8h  17    0    0g   300.000  5000.000 1377.000    71
 2.58030848e+01 3.59554256e-02-1.22940500e-05 1.91163268e-09-1.11092373e-13    2
-1.52199366e+04-1.06762154e+02 1.32658093e-01 8.64671209e-02-4.65433984e-05    3
 1.06335613e-08-5.88247411e-13-5.31914645e+03 3.45289960e+01                   4
c8h17co    1/29/ 7 thermc   9h  17o   1    0g   300.000  5000.000 1381.000    81
 3.03592380e+01 3.68840846e-02-1.26072367e-05 1.95920120e-09-1.13804948e-13    2
-3.36720015e+04-1.26849226e+02 1.82233343e+00 9.72530556e-02-5.95513838e-05    3
 1.78318031e-08-2.06786794e-12-2.30856771e+04 2.87259688e+01                   4
c8h16-1    1/24/ 7 thermc   8h  16    0    0g   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.51778228e+01 3.42527893e-02-1.15030747e-05 1.76713382e-09-1.01895167e-13    2
-2.28120614e+04-1.05252884e+02-1.63703064e+00 9.35366795e-02-6.07059197e-05    3
 2.00471199e-08-2.67714057e-12-1.31512201e+04 3.99745995e+01                   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+05-0.78117493E+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
c8h15-24 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
c8h15-35 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
c8h16co    09/04/09      c   9h  16o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.24201784E+02 0.32566622E-01-0.89253972E-05 0.12212871E-08-0.67761226E-13    2
-0.27057434E+05-0.10713449E+03-0.11967636E+01 0.89993037E-01-0.49485014E-04    3
 0.84773930E-08 0.11965322E-11-0.18919107E+05 0.28431087E+02                   4
c7h15cho   1/29/ 7 thermc   8h  16o   1    0g   300.000  5000.000 1381.000    71
 2.72006502e+01 3.49409136e-02-1.18609347e-05 1.83427416e-09-1.06203411e-13    2
-4.83387014e+04-1.12781881e+02 1.23723265e+00 8.99886630e-02-5.48474184e-05    3
 1.64762137e-08-1.93162221e-12-3.87168768e+04 2.87236676e+01                   4
c3h6cho    4/19/ 7 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1383.000    31
 1.24693508e+01 1.67300978e-02-5.56302706e-06 8.46420638e-10-4.84485831e-14    2
-6.16707881e+03-3.58872422e+01 2.79466915e+00 3.67627440e-02-2.07628161e-05    3
 5.84591583e-09-6.45117444e-13-2.51143532e+03 1.70486473e+01                   4
choc4h8cho 8/10/ 7 thermc   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1383.000    51
 1.97957783e+01 2.49457433e-02-8.38957802e-06 1.28632815e-09-7.40019242e-14    2
-4.88614767e+04-7.05934018e+01 4.12841763e+00 5.82104896e-02-3.47910608e-05    3
 1.06622238e-08-1.34273193e-12-4.30178841e+04 1.48500626e+01                   4
c7h15coco  5/16/ 7       c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1383.000    71
 3.05792118e+01 3.46669890e-02-1.18673211e-05 1.84608432e-09-1.07306363e-13    2
-4.37527188e+04-1.25350165e+02 1.89682050e+00 9.75554375e-02-6.36145724e-05    3
 2.09236423e-08-2.78074452e-12-3.33428367e+04 3.02181433e+01                   4
nc3h7coc2h5 2/22/96 thrmc   6h  12o   1    0g   300.000  5000.000 1378.000    51
 1.99627893e+01 2.68078451e-02-9.08527269e-06 1.40288330e-09-8.11176345e-14    2
-4.37215719e+04-7.68702768e+01 1.28300489e+00 6.70849881e-02-4.19984982e-05    3
 1.36804265e-08-1.86987155e-12-3.68039430e+04 2.48054841e+01                   4
ch3coc2h4cho 4/19/7      c   5h   8o   2    0g   300.000  5000.000 1385.000    41
 1.55648863e+01 2.17696644e-02-7.21396698e-06 1.09233352e-09-6.22790880e-14    2
-4.81267975e+04-4.96147569e+01 3.78707872e+00 4.70835086e-02-2.78499417e-05    3
 8.77330526e-09-1.17758872e-12-4.37474675e+04 1.45358866e+01                   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   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    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
ch3coc3h6cho 4/19/7      c   6h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1384.000    51
 1.89609314e+01 2.59286976e-02-8.65342185e-06 1.31822452e-09-7.54882695e-14    2
-5.23364349e+04-6.65243263e+01 3.59872874e+00 5.88899476e-02-3.53065239e-05    3
 1.10679269e-08-1.45185727e-12-4.66357242e+04 1.71414450e+01                   4
ch3ch2coch2  18/ 7 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1391.000    21
 1.32883199e+01 1.65319063e-02-5.41499866e-06 8.14937370e-10-4.63075979e-14    2
-1.35630527e+04-4.30728834e+01 1.37919703e+00 4.52010388e-02-3.22587103e-05    3
 1.24482741e-08-2.00701086e-12-9.49659572e+03 2.06120099e+01                   4
c2h5coc2h4 4/18/ 7 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1393.000    41
 1.39027359e+01 2.30834540e-02-7.40146373e-06 1.09331271e-09-6.12595063e-14    2
-1.33073342e+04-4.16445563e+01 2.36580973e+00 5.11297250e-02-3.44316279e-05    3
 1.33455855e-08-2.23877893e-12-9.34221728e+03 2.00408972e+01                   4
c3h7co     1/29/ 7 thermc   4h   7o   1    0g   300.000  5000.000 1381.000    31
 1.26093720e+01 1.65909682e-02-5.54984145e-06 8.48238009e-10-4.87047878e-14    2
-1.23440083e+04-3.79000032e+01 2.80259164e+00 3.64362068e-02-1.99703619e-05    3
 5.21914385e-09-4.91169039e-13-8.59470153e+03 1.59183852e+01                   4
c3h7coch2  4/18/ 7 thermc   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    41
 1.67709127e+01 2.06816749e-02-6.88259980e-06 1.04666122e-09-5.98873883e-14    2
-1.78085761e+04-6.04937315e+01 1.19498829e+00 5.72072128e-02-3.99568774e-05    3
 1.48517052e-08-2.30101547e-12-1.23930360e+04 2.31442374e+01                   4
c8h14co    09/04/09      c   9h  14o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23479391E+02 0.28579960E-01-0.76853730E-05 0.10364974E-08-0.56903321E-13    2
-0.11470270E+05-0.10275906E+03-0.10364834E+01 0.84920399E-01-0.49339262E-04    3
 0.10445531E-07 0.35589123E-12-0.36748013E+04 0.27837570E+02                   4
c7ald5oxo  29/05/06      c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10885192E+02 0.84281601E-01-0.36668898E-04 0.69605202E-08-0.48480106E-12    2
-0.43238359E+05 0.10412210E+03 0.13360791E+01 0.81497714E-01-0.55682529E-04    3
 0.14036773E-07 0.18568532E-11-0.49967207E+05 0.29047081E+02                   4
c8ald5oxo  29/05/06      c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
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
c6h13cocho 4/19/ 7 thermc   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1383.000    61
 2.75771424e+01 3.26052080e-02-1.10841275e-05 1.71587623e-09-9.94178991e-14    2
-5.84744626e+04-1.12171262e+02 1.30629233e+00 9.06359135e-02-5.93676448e-05    3
 1.97951535e-08-2.68495424e-12-4.89841384e+04 3.01623300e+01                   4
naoj2*o    7/11/ 7 thermc   9h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1386.000    81
 3.10853530e+01 3.75724569e-02-1.27148275e-05 1.95689628e-09-1.12879961e-13    2
-6.47250129e+04-1.26417751e+02 7.83320328e-01 1.07161744e-01-7.39951975e-05    3
 2.67016262e-08-3.99138198e-12-5.40414005e+04 3.68186278e+01                   4
c7h1317    2/ 1/ 7 thermc   7h  13    0    0g   300.000  5000.000 1385.000    51
 2.13233608e+01 2.79992213e-02-9.39252374e-06 1.44173031e-09-8.30863615e-14    2
 6.46244694e+03-8.30443108e+01-6.54374192e-01 7.68650292e-02-5.02943528e-05    3
 1.68203953e-08-2.28426934e-12 1.43524284e+04 3.58867820e+01                   4
mo7d5d     2/12/ 7 thermc   9h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1394.000    61
 2.80881577e+01 3.53418654e-02-1.15278769e-05 1.72857737e-09-9.79616585e-14    2
-5.03848319e+04-1.14813643e+02 2.94556777e-01 1.06698459e-01-8.35486817e-05    3
 3.54146894e-08-6.18224162e-12-4.13358021e+04 3.22424755e+01                   4
c7h1213    2/ 2/ 7 thermc   7h  12    0    0g   300.000  5000.000 1394.000    41
 2.08538195e+01 2.61116330e-02-8.51018479e-06 1.28041052e-09-7.28207508e-14    2
-5.88694824e+03-8.40763324e+01-2.76299964e+00 8.57807288e-02-6.71714475e-05    3
 2.78309997e-08-4.70485599e-12 1.83965266e+03 4.11242591e+01                   4
c8h1413    2/ 2/ 7 thermc   8h  14    0    0g   300.000  5000.000 1392.000    51
 2.42561827e+01 3.03202221e-02-9.95865876e-06 1.50661190e-09-8.60031140e-14    2
-1.00884183e+04-1.01012877e+02-2.95885328e+00 9.78715356e-02-7.50945020e-05    3
 3.04374758e-08-5.05024884e-12-1.05546745e+03 4.37059045e+01                   4
mn9*o  14/04/09          c  10h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.68176751E+01 0.10898200E+00-0.45739667E-04 0.84640632E-08-0.57883630E-12    2
-0.75914344E+05 0.92254707E+02-0.98198903E+00 0.13163467E+00-0.94579758E-04    3
```

```
 0.27037766E-07 0.10352965E-11-0.81762586E+05 0.47115826E+02                   4
mn9j*o  14/04/09        c  10h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.38147507E+01 0.98942056E-01-0.39651866E-04 0.71041217E-08-0.47486510E-12    2
-0.58883770E+05 0.78092804E+02-0.21552594E+00 0.12734912E+00-0.95022988E-04    3
 0.30213599E-07-0.33232558E-12-0.64035363E+05 0.44769939E+02                   4
nc3h7coc2h4 4/18/7 thermc   6h  11o   1    0g   300.000  5000.000 1390.000    51
 1.74024237e+01 2.71794816e-02-8.82535923e-06 1.31737348e-09-7.43847341e-14    2
-1.75552729e+04-5.91486276e+01 2.17870058e+00 6.31524251e-02-4.21620989e-05    3
 1.57731388e-08-2.53665979e-12-1.22382878e+04 2.25859532e+01                   4
c8ald4oxo  29/05/06     c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
mn9o   14/04/09        c   10h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.10394714E+02 0.11388330E+00-0.47097099E-04 0.86262215E-08-0.58567750E-12    2
-0.63446227E+05 0.99634293E+02-0.46388440E+01 0.14249504E+00-0.10563868E-03    3
 0.31030510E-07 0.10297737E-11-0.69918258E+05 0.52661243E+02                   4
oct1o2                  c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23576578E+02 0.39914966E-01-0.12175693E-04 0.18009346E-08-0.10547033E-12    2
-0.37596777E+05-0.98762543E+02-0.58987689E+00 0.97434640E-01-0.55419820E-04    3
 0.10336271E-07 0.12337439E-11-0.30177129E+05 0.29095890E+02                   4
oct2o2                  c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46371681E+02 0.75679184E-02-0.86155183E-06 0.59270415E-10-0.20545153E-14    2
-0.49841270E+05-0.22908505E+03 0.11673839E+01 0.88898629E-01-0.39652052E-04    3
 0.16419338E-08 0.10761911E-11-0.32983473E+05 0.20442610E+02                   4
oct3o2                  c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46371681E+02 0.75679184E-02-0.86155183E-06 0.59270415E-10-0.20545153E-14    2
-0.49569527E+05-0.22908505E+03 0.11673839E+01 0.88898629E-01-0.39652052E-04    3
 0.16419338E-08 0.10761911E-11-0.32711734E+05 0.20442610E+02                   4
oct4o2                  c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46371681E+02 0.75679184E-02-0.86155183E-06 0.59270415E-10-0.20545153E-14    2
-0.49569527E+05-0.22908505E+03 0.11673839E+01 0.88898629E-01-0.39652052E-04    3
 0.16419338E-08 0.10761911E-11-0.32711734E+05 0.20442610E+02                   4
oct1o2h3j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.26853760E+02 0.37040923E-01-0.10683534E-04 0.15148959E-08-0.86021590E-13    2
-0.23615457E+05-0.10062581E+03-0.40595773E+00 0.11458480E+00-0.96409480E-04    3
 0.47529468E-07-0.10657882E-10-0.15941633E+05 0.40301533E+02                   4
oct2o2h4j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.45767570E+02 0.56488467E-02-0.43247624E-06 0.12110742E-10 0.41825643E-15    2
-0.25811377E+05-0.22324973E+03-0.43811750E-01 0.10124955E+00-0.78330522E-04    3
 0.39742950E-07-0.11607629E-10-0.94454307E+04 0.26210802E+02                   4
oct3o2h1j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49011322E+02 0.66465656E-02-0.62289718E-06 0.28808071E-10-0.26697714E-15    2
-0.34309125E+05-0.22780536E+03 0.17422500E+01 0.10236676E+00-0.69142327E-04    3
 0.26570863E-07-0.64721171E-11-0.17401480E+05 0.30027945E+02                   4
oct5o2h3j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.48598091E+02 0.67842770E-02-0.64741414E-06 0.31975686E-10-0.47349417E-15    2
-0.35217535E+05-0.22522247E+03 0.12435334E+01 0.10678973E+00-0.82407219E-04    3
 0.40584954E-07-0.11430868E-10-0.18464602E+05 0.32105610E+02                   4
oct3o2h5j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.48598091E+02 0.67842770E-02-0.64741414E-06 0.31975686E-10-0.47349417E-15    2
-0.35217535E+05-0.22522247E+03 0.12435334E+01 0.10678973E+00-0.82407219E-04    3
 0.40584954E-07-0.11430868E-10-0.18464602E+05 0.32105610E+02                   4
oct4o2h2j               c   8h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.48456631E+02 0.70454273E-02-0.73342147E-06 0.47449045E-10-0.16154098E-14    2
-0.35202891E+05-0.22452435E+03 0.21875391E+01 0.10008257E+00-0.67443129E-04    3
 0.26976902E-07-0.69654820E-11-0.18555389E+05 0.28173399E+02                   4
oct1o2h3o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.50082458E+02 0.87251123E-02-0.10789971E-05 0.82023742E-10-0.31905499E-14    2
-0.60682598E+05-0.24064651E+03 0.30752873E+01 0.97870447E-01-0.48855400E-04    3
 0.44513473E-08 0.12625311E-11-0.43668098E+05 0.17037510E+02                   4
oct2o2h4o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15453979E+02 0.61032206E-01-0.21580543E-04 0.35406040E-08-0.22251051E-12    2
-0.48518367E+05-0.44747253E+02 0.22229466E+00 0.11545972E+00-0.77604069E-04    3
 0.18138294E-07 0.19628515E-11-0.45912422E+05 0.28641518E+02                   4
oct3o2h1o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.50148045E+02 0.86082639E-02-0.10103802E-05 0.65841166E-10-0.18653548E-14    2
-0.60708727E+05-0.24031862E+03 0.30267348E+01 0.98203175E-01-0.49647533E-04    3
 0.52382978E-08 0.98428958E-12-0.43662832E+05 0.17936831E+02                   4
oct3o2h5o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15453979E+02 0.61032206E-01-0.21580543E-04 0.35406040E-08-0.22251051E-12    2
-0.48246629E+05-0.44054169E+02 0.22229466E+00 0.11545972E+00-0.77604069E-04    3
 0.18138294E-07 0.19628515E-11-0.45640684E+05 0.29334600E+02                   4
oct5o2h3o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.15453979E+02 0.61032206E-01-0.21580543E-04 0.35406040E-08-0.22251051E-12    2
-0.48246629E+05-0.44054169E+02 0.22229466E+00 0.11545972E+00-0.77604069E-04    3
 0.18138294E-07 0.19628515E-11-0.45640684E+05 0.29334600E+02                   4
oct4o2h2o2              c   8h  17o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
```

```
 0.15453979E+02 0.61032206E-01-0.21580543E-04 0.35406040E-08-0.22251051E-12    2
-0.48518367E+05-0.44054169E+02 0.22229466E+00 0.11545972E+00-0.77604069E-04    3
 0.18138294E-07 0.19628515E-11-0.45912422E+05 0.29334600E+02                   4
oct3o2h1*o              c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.81503620E+01 0.70391484E-01-0.27240338E-04 0.47624451E-08-0.31291847E-12    2
-0.51816680E+05 0.55914383E+01 0.14876269E+01 0.10638937E+00-0.71089395E-04    3
 0.17282511E-07 0.16100971E-11-0.52051156E+05 0.32888512E+02                   4
oct4o2h2*o              c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.97356548E+01 0.67534767E-01-0.25778738E-04 0.44628194E-08-0.29116458E-12    2
-0.56141086E+05-0.38830795E+01 0.11900541E+01 0.10611945E+00-0.70783659E-04    3
 0.18135266E-07 0.93998886E-12-0.55550527E+05 0.34200340E+02                   4
oct1o2h3*o              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
oct5o2h3*o              c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.36383281E+01 0.90297543E-01-0.37387152E-04 0.68535488E-08-0.46560596E-12    2
-0.50916320E+05 0.71017807E+02 0.80836082E+00 0.11002732E+00-0.77425240E-04    3
 0.20313115E-07 0.18100614E-11-0.55701895E+05 0.35534988E+02                   4
oct3o2h5*o              c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.36383281E+01 0.90297543E-01-0.37387152E-04 0.68535488E-08-0.46560596E-12    2
-0.50916320E+05 0.71017807E+02 0.80836082E+00 0.11002732E+00-0.77425240E-04    3
 0.20313115E-07 0.18100614E-11-0.55701895E+05 0.35534988E+02                   4
oct2o2h4*o              c   8h  16o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
c8ald3oxo               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
c5h11coch2co            c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.43423600E+01 0.77552386E-01-0.31059997E-04 0.55604392E-08-0.37137662E-12    2
-0.31711254E+05 0.72707840E+02-0.95788473E+00 0.96059471E-01-0.70857386E-04    3
 0.24432708E-07-0.14270678E-11-0.35590402E+05 0.44693489E+02                   4
c8ald5oxo               c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
nprcoprco               c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
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
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!MethylDecanoate!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
md      THERGAS         c  11h  22o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.68273491E+02 0.33053071E-02-0.12260666E-06-0.46940403E-11 0.72503548E-15    2
-0.10008353E+06-0.33397437E+03 0.23288703E+01 0.11679209E+00-0.48133614E-04    3
-0.11031357E-08 0.15618516E-11-0.74916242E+05 0.32049519E+02                   4
md10j   THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67686424E+02 0.19609290E-02-0.36251375E-07-0.37209250E-11 0.38118881E-15    2
-0.74994570E+05-0.32852444E+03 0.13338556E+01 0.12668148E+00-0.78261866E-04    3
 0.27691268E-07-0.78293058E-11-0.50284879E+05 0.36940895E+02                   4
md9j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67154594E+02 0.23195536E-02-0.13101246E-06 0.16200716E-10-0.12344512E-14    2
-0.75897469E+05-0.32537170E+03 0.22846894E+01 0.12089516E+00-0.68162313E-04    3
 0.19725533E-07-0.53645361E-11-0.51492941E+05 0.32944809E+02                   4
md8j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md7j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
```

```
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md6j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md5j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md4j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md3j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67353737E+02 0.19553606E-02 0.20892031E-07-0.18262654E-10 0.15815313E-14    2
-0.75935281E+05-0.32639075E+03 0.10138767E+01 0.12986253E+00-0.88538531E-04    3
 0.38718561E-07-0.11729956E-10-0.51367094E+05 0.38261921E+02                   4
md2j    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67694695E+02 0.22391754E-02-0.69292120E-07 0.94854886E-12 0.31833464E-16    2
-0.79375828E+05-0.33098914E+03 0.14242153E+01 0.12592980E+00-0.76343218E-04    3
 0.26478279E-07-0.76136016E-11-0.54622621E+05 0.34315075E+02                   4
mdmj    THERGAS         c  11h  21o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67686424E+02 0.19609290E-02-0.36251375E-07-0.37209250E-11 0.38118881E-15    2
-0.75346828E+05-0.32852444E+03 0.13338556E+01 0.12668148E+00-0.78261866E-04    3
 0.27691268E-07-0.78293058E-11-0.50637133E+05 0.36940895E+02                   4
daoj                    c  10h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.56907192E+02 0.69804494E-02-0.62206209E-06 0.29222010E-10-0.42739612E-15    2
-0.68968602E+05-0.27322067E+03 0.17896731E+01 0.10609684E+00-0.47273646E-04    3
 0.83005669E-09 0.18424355E-11-0.48427531E+05 0.30999414E+02                   4
md10oo                  c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.71374802E+02 0.32693753E-02-0.10528210E-06-0.58563254E-11 0.75842600E-15    2
-0.93259531E+05-0.34318018E+03 0.31181457E+01 0.12818141E+00-0.64523505E-04    3
 0.78059852E-08-0.55240301E-13-0.67927906E+05 0.33027237E+02                   4
md9oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.30160396E+01 0.10727744E+00-0.42084081E-04 0.74300814E-08-0.49166655E-12    2
-0.67026648E+05 0.43478836E+02-0.25944033E+01 0.16242255E+00-0.12331974E-03    3
 0.39418762E-07-0.88349608E-12-0.69829016E+05 0.57142170E+02                   4
md8oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31394074E+01 0.10706595E+00-0.41974650E-04 0.74071593E-08-0.48996522E-12    2
-0.66803430E+05 0.42789642E+02-0.26678846E+01 0.16294265E+00-0.12459907E-03    3
 0.40728683E-07-0.13592168E-11-0.69549547E+05 0.57450649E+02                   4
md7oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31394074E+01 0.10706595E+00-0.41974650E-04 0.74071593E-08-0.48996522E-12    2
-0.66803430E+05 0.42789078E+02-0.26678846E+01 0.16294265E+00-0.12459907E-03    3
 0.40728683E-07-0.13592168E-11-0.69549547E+05 0.57450081E+02                   4
md6oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.27359498E+01 0.10438407E+00-0.40885247E-04 0.72068556E-08-0.47616338E-12    2
-0.75830930E+05 0.32791931E+02-0.22969091E+01 0.15137994E+00-0.10513674E-03    3
 0.26188479E-07 0.27154765E-11-0.78262578E+05 0.45562439E+02                   4
md5oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31394074E+01 0.10706595E+00-0.41974650E-04 0.74071593E-08-0.48996522E-12    2
-0.66803430E+05 0.42788651E+02-0.26678846E+01 0.16294265E+00-0.12459907E-03    3
 0.40728683E-07-0.13592168E-11-0.69549547E+05 0.57449665E+02                   4
md4oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31394074E+01 0.10706595E+00-0.41974650E-04 0.74071593E-08-0.48996522E-12    2
-0.66803430E+05 0.42788605E+02-0.26678846E+01 0.16294265E+00-0.12459907E-03    3
 0.40728683E-07-0.13592168E-11-0.69549547E+05 0.57449619E+02                   4
md3oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.31394074E+01 0.10706595E+00-0.41974650E-04 0.74071593E-08-0.48996522E-12    2
-0.66803430E+05 0.42788651E+02-0.26678846E+01 0.16294265E+00-0.12459907E-03    3
 0.40728683E-07-0.13592168E-11-0.69549547E+05 0.57449657E+02                   4
md2oo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.51999977E+02 0.29155063E-01-0.67765150E-05 0.82539126E-09-0.42514759E-13    2
-0.86056977E+05-0.23242143E+03-0.71594548E+00 0.14781530E+00-0.93755800E-04    3
 0.22065663E-07-0.25331522E-12-0.68945984E+05 0.49529285E+02                   4
mdmoo                   c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.85906687E+01 0.96180700E-01-0.36249177E-04 0.62200889E-08-0.40332500E-12    2
-0.70276250E+05 0.11734131E+02-0.56800346E+01 0.16972712E+00-0.12952829E-03    3
 0.40338406E-07-0.60139637E-12-0.70175688E+05 0.72082535E+02                   4
md10ooh9j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.71184822E+02 0.28941457E-02-0.93845323E-07-0.18131886E-11 0.34847931E-15    2
-0.87091961E+05-0.33861139E+03 0.28362687E+01 0.13944423E+00-0.99243101E-04    3
 0.43055351E-07-0.12091811E-10-0.62314562E+05 0.35218887E+02                   4
md10ooh8j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.71184822E+02 0.28941457E-02-0.93845323E-07-0.18131886E-11 0.34847931E-15    2
-0.87091961E+05-0.33861139E+03 0.28362687E+01 0.13944423E+00-0.99243101E-04    3
 0.43055351E-07-0.12091811E-10-0.62314562E+05 0.35218887E+02                   4
```

```
md10ooh7j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.75102493E+02 0.54407390E-02-0.37935396E-06 0.23864575E-10-0.11589641E-14    2
-0.91323859E+05-0.35731631E+03 0.29984193E+01 0.14875925E+00-0.10036102E-03    3
 0.38846210E-07-0.10043385E-10-0.65248957E+05 0.37003105E+02                   4
md10ooh6j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.71184822E+02 0.28941457E-02-0.93845323E-07-0.18131886E-11 0.34847931E-15    2
-0.87091961E+05-0.33861139E+03 0.28362687E+01 0.13944423E+00-0.99243101E-04    3
 0.43055351E-07-0.12091811E-10-0.62314562E+05 0.35218887E+02                   4
md9ooh10j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.44207911E+01 0.10434716E+00-0.40510182E-04 0.70991746E-08-0.46726918E-12    2
-0.60711242E+05 0.39744011E+02-0.19144145E+01 0.16602218E+00-0.13693036E-03    3
 0.52773217E-07-0.51573953E-11-0.63553969E+05 0.55988979E+02                   4
md9ooh8j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42133827E+01 0.10406358E+00-0.40257390E-04 0.70364234E-08-0.46223957E-12    2
-0.61339828E+05 0.41207771E+02-0.22771425E+01 0.16951321E+00-0.14798214E-03    3
 0.64600613E-07-0.93490484E-11-0.64279559E+05 0.57489109E+02                   4
md9ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42133827E+01 0.10406358E+00-0.40257390E-04 0.70364234E-08-0.46223957E-12    2
-0.61339828E+05 0.41207771E+02-0.22771425E+01 0.16951321E+00-0.14798214E-03    3
 0.64600613E-07-0.93490484E-11-0.64279559E+05 0.57489109E+02                   4
md9ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42133827E+01 0.10406358E+00-0.40257390E-04 0.70364234E-08-0.46223957E-12    2
-0.61339828E+05 0.41207771E+02-0.22771425E+01 0.16951321E+00-0.14798214E-03    3
 0.64600613E-07-0.93490484E-11-0.64279559E+05 0.57489109E+02                   4
md9ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.42133827E+01 0.10406358E+00-0.40257390E-04 0.70364234E-08-0.46223957E-12    2
-0.61339828E+05 0.41207771E+02-0.22771425E+01 0.16951321E+00-0.14798214E-03    3
 0.64600613E-07-0.93490484E-11-0.64279559E+05 0.57489109E+02                   4
md8ooh10j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.45108614E+01 0.10419591E+00-0.40436666E-04 0.70848212E-08-0.46627508E-12    2
-0.60121812E+05 0.38550278E+02-0.24419951E+01 0.16971873E+00-0.14590051E-03    3
 0.61812251E-07-0.83840365E-11-0.62874051E+05 0.57524979E+02                   4
md8ooh9j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40320282E+01 0.10447216E+00-0.40473238E-04 0.70803390E-08-0.46536023E-12    2
-0.61050680E+05 0.41396736E+02-0.12823647E+01 0.16247483E+00-0.13227609E-03    3
 0.50306223E-07-0.46594642E-11-0.64104320E+05 0.52645927E+02                   4
md8ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md8ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md8ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md8ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md7ooh10j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.45108614E+01 0.10419591E+00-0.40436666E-04 0.70848212E-08-0.46627508E-12    2
-0.60121812E+05 0.38550278E+02-0.24419951E+01 0.16971873E+00-0.14590051E-03    3
 0.61812251E-07-0.83840365E-11-0.62874051E+05 0.57524979E+02                   4
md7ooh9j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40320282E+01 0.10447216E+00-0.40473238E-04 0.70803390E-08-0.46536023E-12    2
-0.61050680E+05 0.41396736E+02-0.12823647E+01 0.16247483E+00-0.13227609E-03    3
 0.50306223E-07-0.46594642E-11-0.64104320E+05 0.52645927E+02                   4
md7ooh8j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md7ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md7ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md7ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md7ooh3j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
```

```
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh10j               c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.45108614E+01 0.10419591E+00-0.40436666E-04 0.70848212E-08-0.46627508E-12    2
-0.60121812E+05 0.38550278E+02-0.24419951E+01 0.16971873E+00-0.14590051E-03    3
 0.61812251E-07-0.83840365E-11-0.62874051E+05 0.57524979E+02                   4
md6ooh9j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40320282E+01 0.10447216E+00-0.40473238E-04 0.70803390E-08-0.46536023E-12    2
-0.61050680E+05 0.41396736E+02-0.12823647E+01 0.16247483E+00-0.13227609E-03    3
 0.50306223E-07-0.46594642E-11-0.64104320E+05 0.52645927E+02                   4
md6ooh8j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh3j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md6ooh2j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.38385439E+01 0.10588912E+00-0.41378691E-04 0.72848669E-08-0.48105384E-12    2
-0.64273797E+05 0.39799400E+02-0.17624789E+01 0.16486265E+00-0.13407496E-03    3
 0.50667765E-07-0.46406286E-11-0.67274594E+05 0.52443439E+02                   4
md5ooh9j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.40320282E+01 0.10447216E+00-0.40473238E-04 0.70803390E-08-0.46536023E-12    2
-0.61050680E+05 0.41396736E+02-0.12823647E+01 0.16247483E+00-0.13227609E-03    3
 0.50306223E-07-0.46594642E-11-0.64104320E+05 0.52645927E+02                   4
md5ooh8j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md5ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md5ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md5ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md5ooh3j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.39904839E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.55916847E+02                   4
md5ooh2j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.38385439E+01 0.10588912E+00-0.41378691E-04 0.72848669E-08-0.48105384E-12    2
-0.64273672E+05 0.39810417E+02-0.18372362E+01 0.16537812E+00-0.13530528E-03    3
 0.51888197E-07-0.50700854E-11-0.67266555E+05 0.52771088E+02                   4
md4ooh8j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md4ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md4ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md4ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
```

```
md4ooh3j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md4ooh2j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.38385439E+01 0.10588912E+00-0.41378691E-04 0.72848669E-08-0.48105384E-12    2
-0.64273547E+05 0.40518272E+02-0.19121238E+01 0.16590753E+00-0.13660033E-03    3
 0.53201706E-07-0.55413473E-11-0.67258688E+05 0.53794342E+02                   4
md3ooh7j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md3ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md3ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md3ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.43224316E+01 0.10387865E+00-0.40164181E-04 0.70174160E-08-0.46086258E-12    2
-0.61111539E+05 0.40597923E+02-0.20696037E+01 0.16807656E+00-0.14454442E-03    3
 0.61188750E-07-0.81500431E-11-0.64030047E+05 0.56609928E+02                   4
md3ooh2j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.38385439E+01 0.10588912E+00-0.41378691E-04 0.72848669E-08-0.48105384E-12    2
-0.64273516E+05 0.40538383E+02-0.19266073E+01 0.16601360E+00-0.13686588E-03    3
 0.53475123E-07-0.56404070E-11-0.67257234E+05 0.53874836E+02                   4
md2ooh6j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52197945E+02 0.28040070E-01-0.63523876E-05 0.76351919E-09-0.39221085E-13    2
-0.80029867E+05-0.22928708E+03-0.68757337E+00 0.15691602E+00-0.12326035E-03    3
 0.52092304E-07-0.10436822E-10-0.63365680E+05 0.51100956E+02                   4
md2ooh5j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52197945E+02 0.28040070E-01-0.63523876E-05 0.76351919E-09-0.39221085E-13    2
-0.80029867E+05-0.22928708E+03-0.68757337E+00 0.15691602E+00-0.12326035E-03    3
 0.52092304E-07-0.10436822E-10-0.63365680E+05 0.51100956E+02                   4
md2ooh4j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52197945E+02 0.28040070E-01-0.63523876E-05 0.76351919E-09-0.39221085E-13    2
-0.80029867E+05-0.22928708E+03-0.68757337E+00 0.15691602E+00-0.12326035E-03    3
 0.52092304E-07-0.10436822E-10-0.63365680E+05 0.51100956E+02                   4
md2ooh3j                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52197945E+02 0.28040070E-01-0.63523876E-05 0.76351919E-09-0.39221085E-13    2
-0.80029867E+05-0.22928708E+03-0.68757337E+00 0.15691602E+00-0.12326035E-03    3
 0.52092304E-07-0.10436822E-10-0.63365680E+05 0.51100956E+02                   4
md2oohmj                c  11h  21o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52781494E+02 0.27601270E-01-0.61517871E-05 0.71861550E-09-0.35570529E-13    2
-0.79541922E+05-0.23281905E+03-0.48172101E+00 0.15453167E+00-0.11490970E-03    3
 0.42998433E-07-0.72237663E-11-0.62623590E+05 0.50262539E+02                   4
md10ooh9oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824753E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735603E+02                   4
md10ooh8oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824493E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735344E+02                   4
md10ooh7oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824341E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735199E+02                   4
md10ooh6oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824280E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735130E+02                   4
md9ooh10oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650633E+05 0.34824844E+02-0.65334594E+00 0.17107973E+00-0.13152522E-03    3
 0.40965627E-07-0.15525130E-12-0.80516125E+05 0.53607563E+02                   4
md9ooh8oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576391E+05 0.56740906E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.83056008E+05 0.55283440E+02                   4
md9ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576391E+05 0.56740768E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.83056008E+05 0.55283295E+02                   4
md9ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
```

```
-0.78576391E+05 0.56740692E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.83056008E+05 0.55283226E+02                   4
md9ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576391E+05 0.56740677E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.83056008E+05 0.55283203E+02                   4
md8ooh10oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824677E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735535E+02                   4
md8ooh9oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576305E+05 0.56050385E+02-0.11368682E+01 0.17540228E+00-0.13825562E-03    3
 0.44556810E-07-0.60178750E-12-0.83051258E+05 0.54781422E+02                   4
md8ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047668E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590199E+02                   4
md8ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047592E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590130E+02                   4
md8ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047577E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590103E+02                   4
md8ooh4oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047607E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590137E+02                   4
md7ooh10oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824463E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735321E+02                   4
md7ooh9oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576305E+05 0.56050385E+02-0.11368682E+01 0.17540228E+00-0.13825562E-03    3
 0.44556810E-07-0.60178750E-12-0.83051258E+05 0.54781422E+02                   4
md7ooh8oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304719E+05 0.56048615E+02-0.10621110E+01 0.17488681E+00-0.13702533E-03    3
 0.43336378E-07-0.17233122E-12-0.82787578E+05 0.54463028E+02                   4
md7ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047592E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590130E+02                   4
md7ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047577E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590103E+02                   4
md7ooh4oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047607E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590137E+02                   4
md7ooh3oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047684E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590221E+02                   4
md6ooh10oo              c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.62157068E+01 0.10916927E+00-0.42540676E-04 0.74720754E-08-0.49247466E-12    2
-0.77650578E+05 0.34824295E+02-0.68348283E+00 0.17128442E+00-0.13200760E-03    3
 0.41439133E-07-0.32044975E-12-0.80512828E+05 0.53735153E+02                   4
md6ooh9oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576305E+05 0.56050385E+02-0.11368682E+01 0.17540228E+00-0.13825562E-03    3
 0.44556810E-07-0.60178750E-12-0.83051258E+05 0.54781422E+02                   4
md6ooh8oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304719E+05 0.56048615E+02-0.10621110E+01 0.17488681E+00-0.13702533E-03    3
 0.43336378E-07-0.17233122E-12-0.82787578E+05 0.54463028E+02                   4
md6ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56048172E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590702E+02                   4
md6ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047577E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590103E+02                   4
```

```
md6ooh4oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047607E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590137E+02                   4
md6ooh3oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047684E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590221E+02                   4
md6ooh2oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35240097E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.37637417E+02                   4
md5ooh9oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78576305E+05 0.56050385E+02-0.11368682E+01 0.17540228E+00-0.13825562E-03    3
 0.44556810E-07-0.60178750E-12-0.83051258E+05 0.54781422E+02                   4
md5ooh8oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304719E+05 0.56048615E+02-0.10621110E+01 0.17488681E+00-0.13702533E-03    3
 0.43336378E-07-0.17233122E-12-0.82787578E+05 0.54463028E+02                   4
md5ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56048172E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590702E+02                   4
md5ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047867E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590405E+02                   4
md5ooh4oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047607E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590137E+02                   4
md5ooh3oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56047684E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590221E+02                   4
md5ooh2oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35240097E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.37637417E+02                   4
md4ooh8oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304719E+05 0.56741699E+02-0.10621110E+01 0.17488681E+00-0.13702533E-03    3
 0.43336378E-07-0.17233122E-12-0.82787578E+05 0.55156113E+02                   4
md4ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56741257E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283787E+02                   4
md4ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56740952E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283489E+02                   4
md4ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56740784E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283318E+02                   4
md4ooh3oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56740768E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283295E+02                   4
md4ooh2oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35170789E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.38330498E+02                   4
md3ooh7oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56741257E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283787E+02                   4
md3ooh6oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56740952E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283489E+02                   4
md3ooh5oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
-0.78304664E+05 0.56740784E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.55283318E+02                   4
md3ooh4oo               c  11h  21o   6    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.23202560E+01 0.11635394E+00-0.46278565E-04 0.82469551E-08-0.54914097E-12    2
```

```
-0.78304664E+05 0.56047607E+02-0.10922478E+01 0.17509151E+00-0.13750770E-03    3
 0.43809887E-07-0.33752935E-12-0.82784281E+05 0.54590145E+02                   4
md3ooh2oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35170789E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.38330498E+02                   4
md2ooh6oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35170786E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.38330528E+02                   4
md2ooh5oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35170801E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.38330360E+02                   4
md2ooh4oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35240118E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.37637184E+02                   4
md2ooh3oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74490799E+02 0.58761807E-02-0.41337489E-06 0.16324584E-10-0.22672168E-15    2
-0.10772073E+06-0.35240125E+03 0.29109755E+01 0.14849629E+00-0.87737128E-04    3
 0.16690633E-07-0.39556878E-12-0.82432555E+05 0.37637146E+02                   4
md2oohmoo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.75855843E+02 0.34227779E-02-0.92598121E-07-0.11125699E-10 0.12174711E-14    2
-0.10979620E+06-0.36063239E+03-0.52063763E-01 0.15495567E+00-0.91913207E-04    3
 0.15575582E-07 0.60047540E-12-0.83064203E+05 0.52752911E+02                   4
mdmooh2j                 c  11h  21o   4   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.91125650E+01 0.95333807E-01-0.35856141E-04 0.61468461E-08-0.39847658E-12    2
-0.67677359E+05 0.10452377E+02-0.49939160E+01 0.17319185E+00-0.14274470E-03    3
 0.54029758E-07-0.52152753E-11-0.67877742E+05 0.68725967E+02                   4
mdmooh2oo                c  11h  21o   6   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.75855843E+02 0.34227779E-02-0.92598121E-07-0.11125699E-10 0.12174711E-14    2
-0.10979620E+06-0.36132715E+03 0.56679048E-01 0.15419468E+00-0.90068759E-04    3
 0.13719457E-07 0.12620174E-11-0.83075750E+05 0.51599068E+02                   4
md9ooh10*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.23994842E+01 0.11917516E+00-0.49552007E-04 0.91095966E-08-0.62009149E-12    2
-0.91561594E+05 0.78897034E+02-0.74345052E+00 0.15819833E+00-0.11475870E-03    3
 0.30131979E-07 0.27107288E-11-0.96915414E+05 0.53197575E+02                   4
md8ooh10*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.63229513E+01 0.12540862E+00-0.52731964E-04 0.97735953E-08-0.66930180E-12    2
-0.90644055E+05 0.10056949E+03 0.31536013E+00 0.15607505E+00-0.11549880E-03    3
 0.32466048E-07 0.19172039E-11-0.97883719E+05 0.47219879E+02                   4
md7ooh10*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.58149414E+01 0.12451588E+00-0.52240903E-04 0.96646886E-08-0.66082524E-12    2
-0.90843672E+05 0.97741791E+02 0.34008998E+00 0.15592864E+00-0.11521673E-03    3
 0.32261376E-07 0.19610210E-11-0.97886680E+05 0.47111805E+02                   4
md6ooh10*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.58149414E+01 0.12451588E+00-0.52240903E-04 0.96646886E-08-0.66082524E-12    2
-0.90843672E+05 0.97741791E+02 0.34008998E+00 0.15592864E+00-0.11521673E-03    3
 0.32261376E-07 0.19610210E-11-0.97886680E+05 0.47111805E+02                   4
md10ooh9*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.57753358E+01 0.12353726E+00-0.51553045E-04 0.95011004E-08-0.64785395E-12    2
-0.91769766E+05 0.97546028E+02 0.11870821E+01 0.15103677E+00-0.11007156E-03    3
 0.31074237E-07 0.16533475E-11-0.98829289E+05 0.43444756E+02                   4
md8ooh9*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.51189691E+00 0.11570873E+00-0.47700942E-04 0.87159195E-08-0.59068256E-12    2
-0.95991375E+05 0.67085213E+02-0.91981357E+00 0.15710668E+00-0.11253177E-03    3
 0.29124299E-07 0.26780572E-11-0.10042800E+06 0.53300491E+02                   4
md7ooh9*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.45316257E+01 0.12209047E+00-0.50930244E-04 0.93841699E-08-0.63979258E-12    2
-0.95036414E+05 0.89990738E+02 0.94833940E-01 0.15525515E+00-0.11383327E-03    3
 0.31924195E-07 0.17530891E-11-0.10139112E+06 0.48207569E+02                   4
md6ooh9*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.45316257E+01 0.12209047E+00-0.50930244E-04 0.93841699E-08-0.63979258E-12    2
-0.95036406E+05 0.89990738E+02 0.94833940E-01 0.15525515E+00-0.11383327E-03    3
 0.31924195E-07 0.17530891E-11-0.10139111E+06 0.48207569E+02                   4
md5ooh9*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.45316257E+01 0.12209047E+00-0.50930244E-04 0.93841699E-08-0.63979258E-12    2
-0.95036406E+05 0.89990738E+02 0.94833940E-01 0.15525515E+00-0.11383327E-03    3
 0.31924195E-07 0.17530891E-11-0.10139111E+06 0.48207569E+02                   4
md10ooh8*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13812409E+02 0.13761832E+00-0.59017846E-04 0.11089538E-07-0.76678117E-12    2
-0.89277828E+05 0.14243445E+03-0.10792446E-01 0.15635422E+00-0.11757298E-03    3
 0.34526714E-07 0.15811822E-11-0.99257898E+05 0.49238525E+02                   4
md9ooh8*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14232306E+02 0.13958621E+00-0.60309012E-04 0.11391174E-07-0.79054265E-12    2
-0.90709875E+05 0.14437006E+03-0.15614108E+01 0.16284616E+00-0.12364067E-03    3
 0.35822392E-07 0.19293362E-11-0.10055198E+06 0.56424797E+02                   4
```

```
md7ooh8*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14232306E+02 0.13958621E+00-0.60309012E-04 0.11391174E-07-0.79054265E-12    2
-0.90709875E+05 0.14367697E+03-0.15614108E+01 0.16284616E+00-0.12364067E-03    3
 0.35822392E-07 0.19293362E-11-0.10055198E+06 0.55731712E+02                   4
md6ooh8*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md5ooh8*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16404747E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.49930187E+02                   4
md4ooh8*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md10ooh7*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13812409E+02 0.13761832E+00-0.59017846E-04 0.11089538E-07-0.76678117E-12    2
-0.89277828E+05 0.14243445E+03-0.10792446E-01 0.15635422E+00-0.11757298E-03    3
 0.34526714E-07 0.15811822E-11-0.99257898E+05 0.49238525E+02                   4
md9ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.90095797E+05 0.16644659E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10180673E+06 0.50553448E+02                   4
md8ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md6ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md5ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16404747E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.49930187E+02                   4
md4ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md3ooh7*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md10ooh6*o               c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.13812409E+02 0.13761832E+00-0.59017846E-04 0.11089538E-07-0.76678117E-12    2
-0.89277828E+05 0.14243445E+03-0.10792446E-01 0.15635422E+00-0.11757298E-03    3
 0.34526714E-07 0.15811822E-11-0.99257898E+05 0.49238525E+02                   4
md9ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18081158E+02 0.14575976E+00-0.63509651E-04 0.12068994E-07-0.84133942E-12    2
-0.90105469E+05 0.16628490E+03-0.20553172E+00 0.15865523E+00-0.11939721E-03    3
 0.33168288E-07 0.29048099E-11-0.10182370E+06 0.49883121E+02                   4
md8ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md7ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md5ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md4ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md3ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md2ooh6*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14579417E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.57119270E+02                   4
md9ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18081158E+02 0.14575976E+00-0.63509651E-04 0.12068994E-07-0.84133942E-12    2
```

```
-0.90105469E+05 0.16628490E+03-0.20553172E+00 0.15865523E+00-0.11939721E-03    3
 0.33168288E-07 0.29048099E-11-0.10182370E+06 0.49883121E+02                   4
md8ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md7ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md6ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md4ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14579417E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.57119270E+02                   4
md3ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.17803535E+02 0.14526644E+00-0.63227228E-04 0.12003870E-07-0.83610137E-12    2
-0.89943219E+05 0.16474055E+03-0.38054490E+00 0.15987702E+00-0.12235466E-03    3
 0.36145156E-07 0.18421829E-11-0.10153334E+06 0.50623272E+02                   4
md2ooh5*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14579417E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.57119270E+02                   4
md8ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md7ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md6ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.18110786E+02 0.14581379E+00-0.63532636E-04 0.12072371E-07-0.84147863E-12    2
-0.89824047E+05 0.16575351E+03-0.36369756E+00 0.15974839E+00-0.12201170E-03    3
 0.35763861E-07 0.19920305E-11-0.10154398E+06 0.49860363E+02                   4
md5ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14510109E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.56426186E+02                   4
md3ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14579417E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.57119270E+02                   4
md2ooh4*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.14488501E+02 0.14003941E+00-0.60557079E-04 0.11445722E-07-0.79474860E-12    2
-0.90610219E+05 0.14579417E+03-0.17246670E+01 0.16395560E+00-0.12624446E-03    3
 0.38356884E-07 0.10555200E-11-0.10053420E+06 0.57119270E+02                   4
md7ooh3*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16477751E+02 0.14326449E+00-0.62229054E-04 0.11798744E-07-0.82110447E-12    2
-0.91898750E+05 0.15664478E+03-0.29208629E+01 0.16474979E+00-0.12501579E-03    3
 0.36943984E-07 0.15164008E-11-0.10202318E+06 0.63939056E+02                   4
md6ooh3*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16477751E+02 0.14326449E+00-0.62229054E-04 0.11798744E-07-0.82110447E-12    2
-0.91898750E+05 0.15664478E+03-0.29208629E+01 0.16474979E+00-0.12501579E-03    3
 0.36943984E-07 0.15164008E-11-0.10202318E+06 0.63939056E+02                   4
md5ooh3*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.16477751E+02 0.14326449E+00-0.62229054E-04 0.11798744E-07-0.82110447E-12    2
-0.91898750E+05 0.15664478E+03-0.29208629E+01 0.16474979E+00-0.12501579E-03    3
 0.36943984E-07 0.15164008E-11-0.10202318E+06 0.63939056E+02                   4
md4ooh3*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.12829080E+02 0.13745032E+00-0.59240199E-04 0.11170944E-07-0.77440203E-12    2
-0.92696000E+05 0.13653537E+03-0.40006475E+01 0.16701591E+00-0.12461023E-03    3
 0.34932732E-07 0.22002738E-11-0.10105260E+06 0.70005898E+02                   4
md2ooh3*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
md6ooh2*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
md5ooh2*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
```

```
md4ooh2*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
md3ooh2*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
mdmooh2*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66965401E+02 0.19354949E-01 0.11983500E-05-0.17014450E-08 0.20115340E-12    2
-0.12925022E+06-0.32086285E+03 0.54137743E+00 0.11759480E+00-0.31509368E-04    3
 0.60093867E-10-0.29398355E-13-0.10143782E+06 0.55562527E+02                   4
md2oohm*o                c  11h  20o   5   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.74327156E+02 0.12590446E-02-0.19182945E-07-0.12594665E-11 0.13668482E-15    2
-0.12421417E+06-0.35522278E+03 0.59283352E+01 0.11997108E+00-0.50532071E-04    3
-0.22044910E-08 0.23951711E-11-0.98261938E+05 0.23939564E+02                   4
mdcy10o8                 c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.63908791E+02 0.22751330E+00-0.11143965E-03 0.23026136E-07-0.17066078E-12    2
-0.48098516E+05 0.40169629E+03-0.73416481E+01 0.16440530E+00-0.12570711E-03    3
 0.38276202E-07 0.27996520E-11-0.73069609E+05 0.74976112E+02                   4
mdcy10o7                 c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66297081E+02 0.21602961E-02-0.69858459E-07 0.13764388E-12 0.10993214E-15    2
-0.81404648E+05-0.32828299E+03-0.18171976E+01 0.12212683E+00-0.53662261E-04    3
-0.34960473E-09 0.20828070E-11-0.55738602E+05 0.48659355E+02                   4
mdcy10o6                 c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.66297081E+02 0.21602961E-02-0.69858459E-07 0.13764388E-12 0.10993214E-15    2
-0.81404648E+05-0.32828299E+03-0.18171976E+01 0.12212683E+00-0.53662261E-04    3
-0.34960473E-09 0.20828070E-11-0.55738602E+05 0.48659355E+02                   4
mdcy9o7                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.66699127E+02 0.23358558E+00-0.11517819E-03 0.23913726E-07-0.17787801E-11    2
-0.49597758E+05 0.41567294E+03-0.80332623E+01 0.17012782E+00-0.13568949E-03    3
 0.45002260E-07 0.12817290E-11-0.75581875E+05 0.76342262E+02                   4
mdcy9o6                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.72434953E+05 0.20245340E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.86067430E+05 0.58949173E+02                   4
mdcy9o5                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.75152344E+05 0.19973599E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.88784828E+05 0.56231766E+02                   4
mdcy8o6                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.66699127E+02 0.23358558E+00-0.11517819E-03 0.23913726E-07-0.17787801E-11    2
-0.49326016E+05 0.41567294E+03-0.80332623E+01 0.17012782E+00-0.13568949E-03    3
 0.45002260E-07 0.12817290E-11-0.75310133E+05 0.76342262E+02                   4
mdcy8o5                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.72163219E+05 0.20245340E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.85795688E+05 0.58949173E+02                   4
mdcy8o4                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.74880617E+05 0.19973599E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.88513094E+05 0.56231766E+02                   4
mdcy7o5                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.66699127E+02 0.23358558E+00-0.11517819E-03 0.23913726E-07-0.17787801E-11    2
-0.49326016E+05 0.41567294E+03-0.80332623E+01 0.17012782E+00-0.13568949E-03    3
 0.45002260E-07 0.12817290E-11-0.75310133E+05 0.76342262E+02                   4
mdcy7o4                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.72163219E+05 0.20245340E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.85795688E+05 0.58949173E+02                   4
mdcy7o3                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.74880617E+05 0.19973599E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.88513094E+05 0.56231766E+02                   4
mdcy6o4                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.66699127E+02 0.23358558E+00-0.11517819E-03 0.23913726E-07-0.17787801E-11    2
-0.49326016E+05 0.41567294E+03-0.80332623E+01 0.17012782E+00-0.13568949E-03    3
 0.45002260E-07 0.12817290E-11-0.75310133E+05 0.76342262E+02                   4
mdcy6o3                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.27861555E+02 0.16118455E+00-0.73784133E-04 0.14520535E-07-0.10381614E-11    2
-0.72163219E+05 0.20245340E+03-0.51969724E+01 0.16783491E+00-0.13102665E-03    3
 0.38967404E-07 0.20210199E-11-0.85795688E+05 0.58949173E+02                   4
mdcy6o2                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.23883162E+02 0.15466575E+00-0.70318987E-04 0.13771086E-07-0.98105226E-12    2
-0.75786070E+05 0.17715897E+03-0.59352374E+01 0.16775475E+00-0.12505476E-03    3
 0.31482411E-07 0.46102514E-11-0.87579328E+05 0.60156387E+02                   4
mdcy5o3                  c  11h  20o   3   0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.66699127E+02 0.23358558E+00-0.11517819E-03 0.23913726E-07-0.17787801E-11    2
```

```
-0.49326016E+05 0.41567294E+03-0.80332623E+01 0.17012782E+00-0.13568949E-03    3
 0.45002260E-07 0.12817290E-11-0.75310133E+05 0.76342262E+02                   4
mdcy5o2                c  11h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.23883162E+02 0.15466575E+00-0.70318987E-04 0.13771086E-07-0.98105226E-12    2
-0.73068672E+05 0.17987637E+03-0.59352374E+01 0.16775475E+00-0.12505476E-03    3
 0.31482411E-07 0.46102514E-11-0.84861930E+05 0.62873787E+02                   4
mdcy4o2                c  11h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.63442081E+02 0.22818910E+00-0.11223285E-03 0.23259984E-07-0.17278396E-11    2
-0.49920289E+05 0.39718707E+03-0.90012407E+01 0.17166944E+00-0.13367958E-03    3
 0.41531631E-07 0.24317059E-11-0.74352211E+05 0.81235664E+02                   4
mdcy2om                c  11h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.18198689E+02 0.14247248E+00-0.63207095E-04 0.12165627E-07-0.85590009E-12    2
-0.76435078E+05 0.14754182E+03-0.92066422E+01 0.17635642E+00-0.13439724E-03    3
 0.35545312E-07 0.37754994E-11-0.85410250E+05 0.78187012E+02                   4
md10ooh                c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.72152718E+02 0.41598701E-02-0.18080797E-06-0.64161337E-11 0.10857485E-14    2
-0.11126067E+06-0.34646777E+03 0.40277758E+01 0.12721717E+00-0.60834453E-04    3
 0.52000759E-08 0.51201111E-12-0.85850305E+05 0.29528963E+02                   4
md9ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.73434919E+00 0.11464971E+00-0.46423891E-04 0.83772447E-08-0.56277238E-12    2
-0.84010844E+05 0.57367256E+02-0.13720480E+01 0.15928374E+00-0.11439509E-03    3
 0.31576764E-07 0.15397046E-11-0.87784773E+05 0.53010506E+02                   4
md8ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.55915405E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51214634E+02                   4
md7ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.55915405E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51214634E+02                   4
md6ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.55915405E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51214634E+02                   4
md5ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.55915405E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51214634E+02                   4
md4ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.56608490E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51907719E+02                   4
md3ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.87032527E+00 0.11441398E+00-0.46298894E-04 0.83504661E-08-0.56074736E-12    2
-0.83792969E+05 0.56608490E+02-0.11114463E+01 0.15747121E+00-0.11003615E-03    3
 0.27229019E-07 0.30749151E-11-0.87540828E+05 0.51907719E+02                   4
md2ooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.51555328E+02 0.32372121E-01-0.81860471E-05 0.10663963E-08-0.57762016E-13    2
-0.10361204E+06-0.22830917E+03 0.52409375E+00 0.14455460E+00-0.84540807E-04    3
 0.13936791E-07 0.22702727E-11-0.86903664E+05 0.45324860E+02                   4
mdmooh                 c  11h  22o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.63207111E+01 0.10337809E+00-0.40386134E-04 0.71074839E-08-0.46915125E-12    2
-0.87238672E+05 0.25634369E+02-0.43322139E+01 0.16572666E+00-0.11855458E-03    3
 0.30470584E-07 0.25325133E-11-0.88144992E+05 0.67419716E+02                   4
md10o                  c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.67514091E+02 0.28026493E-02-0.13032715E-06 0.80407989E-11-0.47234496E-15    2
-0.98493977E+05-0.33808386E+03 0.65733117E+00 0.12317218E+00-0.59710510E-04    3
 0.61709180E-08-0.94560014E-13-0.73483820E+05 0.31136049E+02                   4
md9o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67749125E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75376875E+05 0.55317188E+02                   4
md8o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md7o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md6o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md5o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md4o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md3o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.12628325E+02 0.12763719E+00-0.53221622E-04 0.98037791E-08-0.66829273E-12    2
-0.67477383E+05 0.11394966E+03-0.50498390E+01 0.15664411E+00-0.11438531E-03    3
 0.30921665E-07 0.26028524E-11-0.75105133E+05 0.55317188E+02                   4
md2o                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.48408470E+02 0.28221920E-01-0.65415497E-05 0.78259765E-09-0.39134355E-13    2
-0.91401219E+05-0.22883229E+03-0.29588084E+01 0.14129090E+00-0.85298176E-04    3
 0.16790491E-07 0.99566492E-12-0.74525164E+05 0.46714981E+02                   4
mdmo                   c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.67484212E+01 0.11569252E+00-0.46700072E-04 0.84093621E-08-0.56412893E-12    2
-0.71065656E+05 0.80660339E+02-0.82459898E+01 0.16475210E+00-0.12261518E-03    3
 0.33947650E-07 0.21098997E-11-0.75712227E+05 0.70721886E+02                   4
md10*o                 c  11h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.47455955E+01 0.11466263E+00-0.47522488E-04 0.87154772E-08-0.59218174E-12    2
-0.79422992E+05 0.83147415E+02-0.10827309E+01 0.14272901E+00-0.99806748E-04    3
 0.26704001E-07 0.18094674E-11-0.84668422E+05 0.49324406E+02                   4
mdm*o                  c  11h  20o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.14037107E+02 0.83094016E-01-0.31521082E-04 0.54332263E-08-0.35340201E-12    2
-0.87566359E+05-0.22185440E+02 0.73801184E+00 0.13225839E+00-0.83903506E-04    3
 0.20424633E-07 0.10975130E-11-0.85426680E+05 0.41348438E+02                   4
md10j*o                c  11h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.19529137E+02 0.27527627E-01-0.78680487E-05 0.11086760E-08-0.62698592E-13    2
 0.12976803E+05-0.72470810E+02-0.84445190E+00 0.78663267E-01-0.55399025E-04    3
 0.21858614E-07-0.40476455E-11 0.19235736E+05 0.34974396E+02                   4
mdmj*o                 c  11h  19o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16311275E+02 0.74934885E-01-0.26907179E-04 0.44652255E-08-0.28299837E-12    2
-0.70334781E+05-0.32551651E+02 0.11241678E+01 0.13063115E+00-0.90492300E-04    3
 0.29530980E-07-0.23156446E-11-0.67660680E+05 0.40606380E+02                   4
md9d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66481865E+02 0.13401661E-02-0.75298585E-08-0.52398611E-11 0.47252940E-15    2
-0.84107086E+05-0.32373151E+03 0.26770566E+01 0.11041185E+00-0.44836368E-04    3
-0.22897986E-08 0.18402456E-11-0.59691988E+05 0.30660816E+02                   4
md8d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66279289E+02 0.13430616E-02 0.40593786E-07-0.17549953E-10 0.14952946E-14    2
-0.85472164E+05-0.32303699E+03 0.37735336E+01 0.10499088E+00-0.37963706E-04    3
-0.54403739E-08 0.22766875E-11-0.61221551E+05 0.25330624E+02                   4
md7d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66285843E+02 0.13962244E-02 0.22966363E-07-0.13530731E-10 0.11588161E-14    2
-0.85515555E+05-0.32323434E+03 0.22059913E+01 0.11187289E+00-0.48447484E-04    3
 0.17485382E-08 0.30979955E-12-0.61019465E+05 0.32507656E+02                   4
md6d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66285843E+02 0.13962244E-02 0.22966363E-07-0.13530731E-10 0.11588161E-14    2
-0.85515555E+05-0.32323434E+03 0.22059913E+01 0.11187289E+00-0.48447484E-04    3
 0.17485382E-08 0.30979955E-12-0.61019465E+05 0.32507656E+02                   4
md5d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66285843E+02 0.13962244E-02 0.22966363E-07-0.13530731E-10 0.11588161E-14    2
-0.85515555E+05-0.32323434E+03 0.22059913E+01 0.11187289E+00-0.48447484E-04    3
 0.17485382E-08 0.30979955E-12-0.61019465E+05 0.32507656E+02                   4
md4d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66285843E+02 0.13962244E-02 0.22966363E-07-0.13530731E-10 0.11588161E-14    2
-0.85515555E+05-0.32323434E+03 0.22059913E+01 0.11187289E+00-0.48447484E-04    3
 0.17485382E-08 0.30979955E-12-0.61019465E+05 0.32507656E+02                   4
md3d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.66155449E+02-0.11322753E-01 0.13820341E-04-0.36239010E-08 0.30185557E-12    2
-0.84366633E+05-0.31595322E+03 0.87441719E+00 0.10193321E+00-0.35986734E-04    3
-0.16415350E-08 0.58211075E-12-0.59662863E+05 0.45908913E+02                   4
md2d                   c  11h  20o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.36388407E+01 0.95017485E-01-0.37399834E-04 0.66156050E-08-0.43819763E-12    2
-0.59507352E+05 0.32076149E+02-0.20617373E+01 0.13482030E+00-0.89899455E-04    3
 0.23084674E-07 0.13864605E-11-0.60690508E+05 0.51955505E+02                   4
md9d8j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65388260E+02 0.55889640E-03 0.57596242E-07-0.15254400E-10 0.12580884E-14    2
-0.67673281E+05-0.31737155E+03 0.29884546E+01 0.10922450E+00-0.51395753E-04    3
 0.68745849E-08-0.16988709E-11-0.43837590E+05 0.28860552E+02                   4
md9d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65902855E+02 0.26958113E-03 0.69520631E-07-0.17022847E-10 0.13998775E-14    2
-0.63401367E+05-0.32074707E+03 0.18823706E+01 0.11878158E+00-0.71189366E-04    3
 0.23428301E-07-0.66727860E-11-0.39410418E+05 0.32461643E+02                   4
c9h16co                c  10h  16o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26373266E+02 0.33079397E-01-0.90641679E-05 0.12400996E-08-0.68798225E-13    2
-0.15332238E+05-0.11654731E+03-0.11483178E+01 0.96132502E-01-0.55007949E-04    3
 0.10775553E-07 0.79790883E-12-0.65798188E+04 0.30088684E+02                   4
md8d7j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26373266E+02 0.33079397E-01-0.90641679E-05 0.12400996E-08-0.68798225E-13    2
-0.15332238E+05-0.11654731E+03-0.11483178E+01 0.96132502E-01-0.55007949E-04    3
 0.10775553E-07 0.79790883E-12-0.65798188E+04 0.30088684E+02                   4
md8d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65611443E+02 0.43027962E-03 0.24215639E-07-0.67284837E-11 0.56542334E-15    2
-0.64730676E+05-0.31955768E+03 0.30215118E+01 0.11306013E+00-0.63583386E-04    3
 0.19534967E-07-0.59700569E-11-0.40944438E+05 0.26950981E+02                   4
md7d6j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65108833E+02 0.69797103E-03 0.40910638E-07-0.11940513E-10 0.99192069E-15    2
-0.69550383E+05-0.31666318E+03 0.25635383E+01 0.11091948E+00-0.56668985E-04    3
 0.13194164E-07-0.41600451E-11-0.45681859E+05 0.30156086E+02                   4
md7d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.69758537E+02 0.26403926E-02-0.88558224E-07 0.22868472E-12 0.14319220E-15    2
-0.69091711E+05-0.34038623E+03 0.16379205E+01 0.12910244E+00-0.74801894E-04    3
 0.22121259E-07-0.57459103E-11-0.43678719E+05 0.35131775E+02                   4
md6d5j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65049950E+02 0.80226862E-03-0.20030056E-07 0.23867317E-11-0.17946585E-15    2
-0.69526852E+05-0.31634393E+03 0.28420522E+01 0.10901150E+00-0.52122850E-04    3
 0.86845846E-08-0.25721881E-11-0.45712109E+05 0.28964115E+02                   4
md6d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65645935E+02 0.43354879E-03 0.35655795E-07-0.94140581E-11 0.77894240E-15    2
-0.64785777E+05-0.31991208E+03 0.17803283E+01 0.11768334E+00-0.68655034E-04    3
 0.21336161E-07-0.60351724E-11-0.40777367E+05 0.32745266E+02                   4
md5d4j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65091225E+02 0.73031231E-03 0.21474193E-07-0.72880877E-11 0.60613667E-15    2
-0.69543719E+05-0.31655008E+03 0.29435573E+01 0.10831459E+00-0.50454455E-04    3
 0.70212445E-08-0.19837638E-11-0.45723137E+05 0.28557722E+02                   4
md5d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65645935E+02 0.43354879E-03 0.35655795E-07-0.94140581E-11 0.77894240E-15    2
-0.64785777E+05-0.31991208E+03 0.17803283E+01 0.11768334E+00-0.68655034E-04    3
 0.21336161E-07-0.60351724E-11-0.40777367E+05 0.32745266E+02                   4
md4d3j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.64992409E+02 0.90617611E-03-0.81834393E-07 0.17161217E-10-0.14041408E-14    2
-0.69503781E+05-0.31594922E+03 0.28005483E+01 0.10930108E+00-0.52805797E-04    3
 0.93494101E-08-0.28014349E-11-0.45707777E+05 0.29213306E+02                   4
md4d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.65645935E+02 0.43354879E-03 0.35655795E-07-0.94140581E-11 0.77894240E-15    2
-0.64785777E+05-0.31991208E+03 0.17803283E+01 0.11768334E+00-0.68655034E-04    3
 0.21336161E-07-0.60351724E-11-0.40777367E+05 0.32745266E+02                   4
md3d2j                 c  11h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.39791285E+05 0.75300407E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.39791285E+05 0.75300407E+02                   4
md9oh10j               c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.20984280E+01 0.10409986E+00-0.40511230E-04 0.71079072E-08-0.46805902E-12    2
-0.68051484E+05 0.48109711E+02-0.36543498E+01 0.16430089E+00-0.13904300E-03    3
 0.58485455E-07-0.78572556E-11-0.70921844E+05 0.61634792E+02                   4
md8oh9j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.12935688E+01 0.10493868E+00-0.40843774E-04 0.71666100E-08-0.47192198E-12    2
-0.68227914E+05 0.52773811E+02-0.25373414E+01 0.15733440E+00-0.12603332E-03    3
 0.47534375E-07-0.43067594E-11-0.71523320E+05 0.56938641E+02                   4
md7oh8j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16176887E+01 0.10427939E+00-0.40492694E-04 0.70931390E-08-0.46652027E-12    2
-0.68300484E+05 0.51098869E+02-0.37078519E+01 0.16560104E+00-0.14471436E-03    3
 0.64824640E-07-0.10066280E-10-0.71408141E+05 0.61831684E+02                   4
md6oh7j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16176887E+01 0.10427939E+00-0.40492694E-04 0.70931390E-08-0.46652027E-12    2
-0.68300484E+05 0.51098869E+02-0.37078519E+01 0.16560104E+00-0.14471436E-03    3
 0.64824640E-07-0.10066280E-10-0.71408141E+05 0.61831684E+02                   4
md5oh6j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16176887E+01 0.10427939E+00-0.40492694E-04 0.70931390E-08-0.46652027E-12    2
-0.68300484E+05 0.51098869E+02-0.37078519E+01 0.16560104E+00-0.14471436E-03    3
 0.64824640E-07-0.10066280E-10-0.71408141E+05 0.61831684E+02                   4
md4oh5j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16176887E+01 0.10427939E+00-0.40492694E-04 0.70931390E-08-0.46652027E-12    2
-0.68300484E+05 0.51098869E+02-0.37078519E+01 0.16560104E+00-0.14471436E-03    3
 0.64824640E-07-0.10066280E-10-0.71408141E+05 0.61831684E+02                   4
md3oh4j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.16176887E+01 0.10427939E+00-0.40492694E-04 0.70931390E-08-0.46652027E-12    2
-0.68300484E+05 0.51098869E+02-0.37078519E+01 0.16560104E+00-0.14471436E-03    3
 0.64824640E-07-0.10066280E-10-0.71408141E+05 0.61831684E+02                   4
md2oh3j                c  11h  21o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.49297127E+02 0.28516766E-01-0.65077443E-05 0.77747198E-09-0.39284944E-13    2
-0.87105922E+05-0.21757809E+03-0.19356443E+01 0.15169565E+00-0.11669893E-03    3
 0.48830003E-07-0.98401634E-11-0.70785164E+05 0.54674759E+02                   4
md9oh10oo              c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.38547347E+01 0.10566141E+00-0.41232845E-04 0.72525035E-08-0.47862430E-12    2
-0.94159953E+05 0.31843315E+02-0.18674265E+01 0.15680829E+00-0.11204249E-03    3
 0.30266076E-07 0.17880720E-11-0.96614758E+05 0.47390678E+02                   4
md8oh9oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.30907843E+00 0.11329749E+00-0.45183391E-04 0.80668956E-08-0.53786196E-12    2
-0.94982172E+05 0.54561768E+02-0.20974834E+01 0.15931281E+00-0.11425088E-03    3
 0.29186021E-07 0.30495914E-11-0.99176203E+05 0.47497482E+02                   4
md7oh8oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.30907843E+00 0.11329749E+00-0.45183391E-04 0.80668956E-08-0.53786196E-12    2
-0.94710438E+05 0.54561768E+02-0.20974834E+01 0.15931281E+00-0.11425088E-03    3
 0.29186021E-07 0.30495914E-11-0.98904469E+05 0.47497482E+02                   4
md6oh7oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.30907843E+00 0.11329749E+00-0.45183391E-04 0.80668956E-08-0.53786196E-12    2
-0.94710438E+05 0.54561768E+02-0.20974834E+01 0.15931281E+00-0.11425088E-03    3
 0.29186021E-07 0.30495914E-11-0.98904469E+05 0.47497482E+02                   4
md5oh6oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.30907843E+00 0.11329749E+00-0.45183391E-04 0.80668956E-08-0.53786196E-12    2
-0.94710438E+05 0.54561768E+02-0.20974834E+01 0.15931281E+00-0.11425088E-03    3
 0.29186021E-07 0.30495914E-11-0.98904469E+05 0.47497482E+02                   4
md4oh5oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.58809896E+01 0.94580941E-01-0.35300960E-04 0.60177063E-08-0.38849704E-12    2
-0.53058367E+05 0.18401176E+02-0.33917701E+01 0.16292101E+00-0.14186447E-03    3
 0.62338636E-07-0.92771077E-11-0.54736988E+05 0.50845318E+02                   4
md3oh4oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
-0.30907843E+00 0.11329749E+00-0.45183391E-04 0.80668956E-08-0.53786196E-12    2
-0.94710438E+05 0.54561768E+02-0.20974834E+01 0.15931281E+00-0.11425088E-03    3
 0.29186021E-07 0.30495914E-11-0.98904469E+05 0.47497482E+02                   4
md2oh3oo               c  11h  21o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.69492836E+02 0.61591752E-02-0.44455939E-06 0.13716650E-10 0.21024968E-15    2
-0.12309697E+06-0.34035916E+03 0.13769245E+01 0.13613109E+00-0.71865652E-04    3
 0.84374321E-08 0.11369385E-11-0.98493258E+05 0.32815430E+02                   4
daoj2*o                c  10h  17o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.25989895E+02 0.46972632E-01-0.14900670E-04 0.22674083E-08-0.13545619E-12    2
-0.44214695E+05-0.10238121E+03 0.48557711E+00 0.10985116E+00-0.61936262E-04    3
 0.88167740E-08 0.29546767E-11-0.36726477E+05 0.31479998E+02                   4
c9h19-1                c   9h  19o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26350143E+02 0.40427059E-01-0.11940922E-04 0.17291710E-08-0.99980164E-13    2
-0.15414564E+05-0.10557228E+03-0.22532992E+01 0.11467749E+00-0.85099156E-04    3
 0.36530555E-07-0.73908145E-11-0.67924365E+04 0.44564240E+02                   4
c9h19co                c  10h  19o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.14439592E+02 0.66306114E-01-0.23236109E-04 0.37909431E-08-0.23746445E-12    2
-0.29794018E+05-0.31849770E+02 0.10282343E+00 0.11464641E+00-0.74854739E-04    3
 0.22241357E-07-0.11086123E-11-0.26859562E+05 0.38721786E+02                   4
c9h18co                c  10h  18o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.27093372E+02 0.37074268E-01-0.10310816E-04 0.14263215E-08-0.79751594E-13    2
-0.30919479E+05-0.12091256E+03-0.12752256E+01 0.10099490E+00-0.54695185E-04    3
 0.83867144E-08 0.17778132E-11-0.21828016E+05 0.30537800E+02                   4
c9h19co                c  10h  18o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.14439592E+02 0.66306114E-01-0.23236109E-04 0.37909431E-08-0.23746445E-12    2
-0.29794018E+05-0.31849770E+02 0.10282343E+00 0.11464641E+00-0.74854739E-04    3
 0.22241357E-07-0.11086123E-11-0.26859562E+05 0.38721786E+02                   4
c8h17cho               c   9h  18o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.10656175E+02 0.67636386E-01-0.25312989E-04 0.43239212E-08-0.27958053E-12    2
-0.43701840E+05-0.15405891E+02-0.27634162E+00 0.10589439E+00-0.64632230E-04    3
 0.14973425E-07 0.10100380E-11-0.41712211E+05 0.37642628E+02                   4
c9h19-2                c   9h  19o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.25781618E+02 0.40866196E-01-0.12075371E-04 0.17481452E-08-0.10100340E-12    2
-0.16307393E+05-0.10222578E+03-0.14762962E+01 0.11010053E+00-0.77911558E-04    3
 0.31476084E-07-0.59573713E-11-0.79819585E+04 0.41303757E+02                   4
c9h19-3                c   9h  19o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000      1
 0.26060333E+02 0.40333696E-01-0.11825125E-04 0.16999763E-08-0.97626314E-13    2
-0.16370930E+05-0.10367323E+03-0.22578375E+01 0.11566918E+00-0.90114809E-04    3
 0.42306123E-07-0.94330958E-11-0.79083804E+04 0.44549618E+02                   4
c4h9coc2h4 4/18/ 7 thermc   7h  13o   1    0g   300.000  5000.000 1389.000    61
 2.09032737e+01 3.12716875e-02-1.02471201e-05 1.54103204e-09-8.74842777e-14    2
-2.18031052e+04-7.66578337e+01 1.98976505e+00 7.51858196e-02-4.99109140e-05    3
 1.82117684e-08-2.83678025e-12-1.51341478e+04 2.51389486e+01                   4
c8h17coco  4/18/ 7 thermc  10h  17o   2    0g   300.000  5000.000 1382.000    81
 3.39745861e+01 3.88277535e-02-1.33075231e-05 2.07210245e-09-1.20523261e-13    2
-4.79623303e+04-1.42256554e+02 1.70899514e+00 1.09357540e-01-7.10628129e-05    3
 2.32129632e-08-3.05388006e-12-3.62311207e+04 3.28216794e+01                   4
prcoprcho     4/19/ 7   c   8h  14o   2    0g   300.000  5000.000 1388.000    71
 2.45073778e+01 3.54665457e-02-1.16556072e-05 1.75606895e-09-9.98050011e-14    2
-6.01635819e+04-9.25652929e+01 3.47241379e+00 8.42300268e-02-5.57786388e-05    3
 2.04084378e-08-3.20399251e-12-5.27196423e+04 2.07090722e+01                   4
nprcopr-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
nprcopro2-1      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
nprcopro2h-1     14/4/9 c  7h 14o  1  0g  300.000  5000.000 1000.000            1
-0.82995027E+00 0.75561018E-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
nprcopro-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
c8h17chco  1/29/ 7 thermc  10h 18o  1  0g  300.000  5000.000 1387.000          81
 3.39926317e+01 3.85982977e-02-1.30327867e-05 2.00976367e-09-1.16185162e-13    2
-4.36058154e+04-1.46962338e+02-6.95550425e-01 1.19799167e-01-8.60699387e-05    3
 3.21354939e-08-4.92971835e-12-3.15695594e+04 3.92899167e+01                   4
mn9j8*o  14/04/09     c  10h  17o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000            1
-0.190842088E+01 0.97352743E-01-0.39124956E-04 0.70229214E-08-0.47002577E-12    2
-0.57876484E+05 0.65227905E+02-0.19089887E+01 0.13630672E+00-0.10861352E-03    3
 0.40318447E-07-0.33423587E-11-0.61939465E+05 0.50641712E+02                   4
mn9oo8*o     THERGAS    c  10h  17o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.50569963E+01 0.10939323E+00-0.44686454E-04 0.81149567E-08-0.54767172E-12    2
-0.71444703E+05 0.90719513E+02 0.36401793E+00 0.14106102E+00-0.10904546E-03    3
 0.34663586E-07 0.35178857E-13-0.78000336E+05 0.44788925E+02                   4
mn9ooh8*o    THERGAS    c  10h  18o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.75182762E+01 0.11728982E+00-0.49473027E-04 0.91865653E-08-0.62976257E-12    2
-0.88391359E+05 0.10481673E+03 0.15441039E+01 0.13819808E+00-0.10074367E-03    3
 0.27408362E-07 0.22613111E-11-0.95951320E+05 0.40146374E+02                   4
mn9o8*o      THERGAS    c  10h  17o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.75489492E+01 0.10951425E+00-0.44915378E-04 0.81774152E-08-0.55277847E-12    2
-0.70564148E+05 0.10072076E+03-0.12804127E+01 0.13870218E+00-0.10919644E-03    3
 0.38044440E-07-0.17381760E-11-0.77229305E+05 0.50712524E+02                   4
mn9j7*o  14/04/09     c  10h  17o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000            1
-0.14543821E+02 0.11789476E+00-0.49574312E-04 0.91864836E-08-0.62889798E-12    2
-0.51503680E+05 0.13797911E+03-0.25572417E+01 0.14453052E+00-0.12966621E-03    3
 0.57624590E-07-0.77638607E-11-0.60793371E+05 0.54226643E+02                   4
mn9oo7*o     THERGAS    c  10h  17o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.12621878E+02 0.12253229E+00-0.51555839E-04 0.95587618E-08-0.65468079E-12    2
-0.69118500E+05 0.13303497E+03-0.78321379E+00 0.14606562E+00-0.11589975E-03    3
 0.37581330E-07 0.11214407E-12-0.78434859E+05 0.50362427E+02                   4
mn9ooh7*o    THERGAS    c  10h  18o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.15085877E+02 0.13060108E+00-0.56561326E-04 0.10699904E-07-0.74332554E-12    2
-0.86091594E+05 0.14706750E+03 0.35427830E+00 0.14351138E+00-0.10836920E-03    3
 0.31121314E-07 0.20493021E-11-0.96381492E+05 0.45899017E+02                   4
mn9o7*o      THERGAS    c  10h  17o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.14804407E+02 0.12213726E+00-0.51530835E-04 0.95707096E-08-0.65621353E-12    2
-0.68362148E+05 0.14130283E+03-0.22766354E+01 0.14268883E+00-0.11368463E-03    3
 0.38685155E-07-0.88623884E-12-0.77680383E+05 0.55642063E+02                   4
mn9j6*o      THERGAS    c  10h  17o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.14543821E+02 0.11789476E+00-0.49574312E-04 0.91864836E-08-0.62889798E-12    2
-0.51503680E+05 0.13797911E+03-0.25572417E+01 0.14453052E+00-0.12966621E-03    3
 0.57624590E-07-0.77638607E-11-0.60793371E+05 0.54226643E+02                   4
mn9oo6*o     THERGAS    c  10h  17o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.12621878E+02 0.12253229E+00-0.51555839E-04 0.95587618E-08-0.65468079E-12    2
-0.69118047E+05 0.13303575E+03-0.10519161E+01 0.14792538E+00-0.12035651E-03    3
 0.42018968E-07-0.14546316E-11-0.78406062E+05 0.51500454E+02                   4
mn9ooh6*o    THERGAS    c  10h  18o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.15085877E+02 0.13060108E+00-0.56561326E-04 0.10699904E-07-0.74332554E-12    2
-0.86091594E+05 0.14706750E+03 0.35427830E+00 0.14351138E+00-0.10836920E-03    3
 0.31121314E-07 0.20493021E-11-0.96381492E+05 0.45899017E+02                   4
mn9o6*o      THERGAS    c  10h  17o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.14804407E+02 0.12213726E+00-0.51530835E-04 0.95707096E-08-0.65621353E-12    2
-0.68362141E+05 0.14130220E+03-0.22917037E+01 0.14279115E+00-0.11392582E-03    3
 0.38921904E-07-0.96883699E-12-0.77678734E+05 0.55705513E+02                   4
mo8j7*o      THERGAS    c  9h  15o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.34350009E+01 0.90666391E-01-0.36761732E-04 0.66389494E-08-0.44619348E-12    2
-0.54572887E+05 0.71322586E+02-0.16621586E+01 0.12424994E+00-0.10121119E-03    3
 0.38624265E-07-0.34499313E-11-0.59049926E+05 0.47806568E+02                   4
mo8oo7*o     THERGAS    c  9h  15o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.69042978E+01 0.10328443E+00-0.42639360E-04 0.77997635E-08-0.52906301E-12    2
-0.68019914E+05 0.98589043E+02 0.48906201E+00 0.12981713E+00-0.10350837E-03    3
 0.34736569E-07-0.66312895E-12-0.75097344E+05 0.42473915E+02                   4
mo8ooh7*o    THERGAS    c  9h  16o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.95919580E+01 0.11165183E+00-0.47750240E-04 0.89551042E-08-0.61835427E-12    2
-0.84887344E+05 0.11460832E+03 0.18650575E+01 0.12560850E+00-0.92005568E-04    3
 0.24315032E-07 0.26745574E-11-0.93069484E+05 0.37693840E+02                   4
mo8o7*o      THERGAS    c  9h  15o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.91962738E+01 0.10306932E+00-0.42711563E-04 0.78334734E-08-0.53232532E-12    2
-0.67216836E+05 0.10747502E+03-0.97470599E+00 0.12624551E+00-0.10085115E-03    3
 0.35423007E-07-0.15214093E-11-0.74346203E+05 0.47626801E+02                   4
```

```
-0.11685162E+05-0.91825546E+02-0.17517318E+01 0.99764057E-01-0.58963800E-04    3
 0.10197658E-07 0.19861714E-11-0.41827935E+04 0.40228237E+02                   4
c7h1311   14/04/09     c  7h  13o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000            1
 0.19529137E+02 0.27527627E-01-0.78680487E-05 0.11086760E-08-0.62698592E-13    2
 0.12976803E+05-0.72470810E+02-0.84445190E+00 0.78663267E-01-0.55399025E-04    3
 0.21858614E-07-0.40476455E-11 0.19235736E+05 0.34974396E+02                   4
c2h5coc3h6   14/04/09  c  6h  11o  3  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   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   14/4/9 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   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
io2c4h8ooh  06/03/09    c  4h  9o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000           1
 0.12659351E+02 0.31527895E-01-0.10420144E-04 0.16298725E-08-0.99093944E-13    2
-0.24969453E+05-0.26117828E+02 0.13668505E+01 0.74122682E-01-0.59753726E-04    3
 0.21177552E-07-0.16305609E-11-0.23110443E+05 0.27826979E+02                   4
md10o9*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.57945447E+01 0.11578659E+00-0.47040790E-04 0.85070031E-08-0.57229080E-12    2
-0.73954812E+05 0.93364944E+02-0.16253183E+01 0.15143904E+00-0.11823788E-03    3
 0.41386915E-07-0.22200941E-11-0.80108320E+05 0.53963028E+02                   4
md10o8*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13257565E+02 0.12872933E+00-0.53797896E-04 0.99261692E-08-0.67745359E-12    2
-0.71664398E+05 0.13512229E+03-0.24808356E+01 0.15442841E+00-0.12027693E-03    3
 0.39529496E-07-0.46570506E-12-0.80574172E+05 0.58299660E+02                   4
md10o7*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13257565E+02 0.12872933E+00-0.53797896E-04 0.99261692E-08-0.67745359E-12    2
-0.71664586E+05 0.13512177E+03-0.23759422E+01 0.15370822E+00-0.11856423E-03    3
 0.37835559E-07 0.12895155E-12-0.80585500E+05 0.57853718E+02                   4
md10o6*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13257565E+02 0.12872933E+00-0.53797896E-04 0.99261692E-08-0.67745359E-12    2
-0.71664531E+05 0.13512144E+03-0.24060793E+01 0.15391292E+00-0.11904661E-03    3
 0.38309064E-07-0.36247254E-13-0.80582211E+05 0.57981537E+02                   4
md9o10*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.22325723E+01 0.11112139E+00-0.44892407E-04 0.80860900E-08-0.54241675E-12    2
-0.72766633E+05 0.72974182E+02-0.35250883E+01 0.15840431E+00-0.12249775E-03    3
 0.40063107E-07-0.10434064E-11-0.77141180E+05 0.62888557E+02                   4
md9o8*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13909196E+02 0.13106300E+00-0.55261746E-04 0.10261460E-07-0.70359219E-12    2
-0.71941664E+05 0.13767625E+03-0.37971392E+01 0.15929289E+00-0.12242675E-03    3
 0.36902861E-07 0.12756560E-11-0.80836539E+05 0.63801952E+02                   4
md9o7*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17829927E+02 0.13731100E+00-0.58442802E-04 0.10922794E-07-0.75234177E-12    2
-0.71304664E+05 0.16001068E+03-0.29845824E+01 0.15884963E+00-0.12712425E-03    3
 0.43102556E-07-0.85524665E-12-0.82049867E+05 0.59563911E+02                   4
md9o6*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71397664E+05 0.15868022E+03-0.29672637E+01 0.15874301E+00-0.12690690E-03    3
 0.42929237E-07-0.81035265E-12-0.82051875E+05 0.59488804E+02                   4
md9o5*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71397664E+05 0.15868022E+03-0.29672637E+01 0.15874301E+00-0.12690690E-03    3
 0.42929237E-07-0.81035265E-12-0.82051875E+05 0.59488804E+02                   4
md8o10*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.59960856E+01 0.11702645E+00-0.47860209E-04 0.86982519E-08-0.58736197E-12    2
-0.71903359E+05 0.94472809E+02-0.24694357E+01 0.15632473E+00-0.12339668E-03    3
 0.42609159E-07-0.19302619E-11-0.78109477E+05 0.57613613E+02                   4
md8o9*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.68203872E+00 0.10827926E+00-0.43407526E-04 0.77771611E-08-0.51977834E-12    2
-0.77069766E+05 0.63714226E+02-0.34988372E+01 0.15589449E+00-0.11682783E-03    3
 0.35577792E-07 0.17012524E-12-0.80675320E+05 0.62827503E+02                   4
md8o7*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13936123E+02 0.13110627E+00-0.55274908E-04 0.10261898E-07-0.70345314E-12    2
-0.71931766E+05 0.13782484E+03-0.40649619E+01 0.16114721E+00-0.12686804E-03    3
 0.41317367E-07-0.27865484E-12-0.80807844E+05 0.64934875E+02                   4
md8o6*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126070E+05 0.15867819E+03-0.28927109E+01 0.15822893E+00-0.12567993E-03    3
 0.41712109E-07-0.38205393E-12-0.81788164E+05 0.59171009E+02                   4
```

```
mo8j6*o     THERGAS    c  9h  15o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.16526066E+02 0.11208372E+00-0.47746144E-04 0.89297298E-08-0.61540362E-12    2
-0.48033805E+05 0.14657288E+03-0.22059662E+01 0.13171746E+00-0.12036204E-03    3
 0.53942507E-07-0.71358327E-11-0.57914586E+05 0.50953190E+02                   4
mo8oo6*o     THERGAS    c  9h  15o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.14469458E+02 0.11648502E+00-0.49591363E-04 0.92702672E-08-0.63861237E-12    2
-0.65702844E+05 0.14087799E+03-0.67099088E+00 0.13491234E+00-0.11058323E-03    3
 0.37877076E-07-0.66605033E-12-0.75530555E+05 0.48101429E+02                   4
mo8ooh6*o    THERGAS    c  9h  16o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17132484E+02 0.12499085E+00-0.54913835E-04 0.10495935E-07-0.73468087E-12    2
-0.82609344E+05 0.15667459E+03 0.45520085E+00 0.13243288E+00-0.10322525E-03    3
 0.31584271E-07 0.12132010E-11-0.93475898E+05 0.44380424E+02                   4
mo8o6*o     THERGAS    c  9h  15o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.17014374E+02 0.11673780E+00-0.49926559E-04 0.93624344E-08-0.64638968E-12    2
-0.64807283E+05 0.15115504E+03-0.19764233E+01 0.13022245E+00-0.10518503E-03    3
 0.35767421E-07-0.51227040E-12-0.74796078E+05 0.52585949E+02                   4
mo8j5*o     THERGAS    c  9h  15o  3  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.16526066E+02 0.11208372E+00-0.47746144E-04 0.89297298E-08-0.61540362E-12    2
-0.48033805E+05 0.14657288E+03-0.22059662E+01 0.13171746E+00-0.12036204E-03    3
 0.53942507E-07-0.71358327E-11-0.57914586E+05 0.50953190E+02                   4
mo8oo5*o     THERGAS    c  9h  15o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.14469458E+02 0.11648502E+00-0.49591363E-04 0.92702672E-08-0.63861237E-12    2
-0.65703031E+05 0.14087703E+03-0.56609660E+00 0.13419217E+00-0.10887055E-03    3
 0.36183138E-07-0.71394442E-13-0.75541891E+05 0.47655704E+02                   4
mo8ooh5*o    THERGAS    c  9h  16o  5  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17132484E+02 0.12499085E+00-0.54913835E-04 0.10495935E-07-0.73468087E-12    2
-0.82609344E+05 0.15667459E+03 0.45520085E+00 0.13243288E+00-0.10322525E-03    3
 0.31584271E-07 0.12132010E-11-0.93475898E+05 0.44380424E+02                   4
mo8o5*o     THERGAS    c  9h  15o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.17014374E+02 0.11673780E+00-0.49926559E-04 0.93624344E-08-0.64638968E-12    2
-0.64807383E+05 0.15115390E+03-0.18866997E+01 0.12960532E+00-0.10371520E-03    3
 0.34311888E-07-0.79275476E-15-0.74805750E+05 0.52204552E+02                   4
c8ald2oxo  14/04/09     c  8h  14o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.16526066E+02 0.11208372E+00-0.47746144E-04 0.89297298E-08-0.61540362E-12    2
-0.48033805E+05 0.14657288E+03-0.22059662E+01 0.13171746E+00-0.12036204E-03    3
 0.53942507E-07-0.71358327E-11-0.57914586E+05 0.50953190E+02                   4
c9ald3oxo  14/04/09     c  9h  16o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.95883770E+01 0.75582668E-01-0.29425124E-04 0.51648414E-08-0.34023606E-12    2
-0.70314586E+05-0.53964310E+01-0.95427305E+00 0.11874953E+00-0.75927455E-04    3
 0.16104751E-07 0.25151240E-11-0.69160641E+05 0.43153454E+02                   4
c9ald2oxo  14/04/09     c  9h  16o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.23047348E+02 0.45658283E-01-0.15315267E-04 0.24239051E-08-0.14873119E-12    2
-0.58208430E+05-0.87570572E+02 0.86317772E+00 0.10103536E+00-0.57339763E-04    3
 0.83712184E-08 0.27071245E-11-0.51762766E+05 0.28610826E+02                   4
c9ald5oxo  14/04/09     c  9h  16o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.73688302E+01 0.96636087E-01-0.40675688E-04 0.75417566E-08-0.51645418E-12    2
-0.49995742E+05 0.89448219E+02 0.73609143E+00 0.10634527E+00-0.72250514E-04    3
 0.19195118E-07 0.14393408E-11-0.55734809E+05 0.35166233E+02                   4
c9ald4oxo  14/04/09     c  9h  16o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.73688302E+01 0.96636087E-01-0.40675688E-04 0.75417566E-08-0.51645418E-12    2
-0.49995742E+05 0.89448219E+02 0.73609143E+00 0.10634527E+00-0.72250514E-04    3
 0.19195118E-07 0.14393408E-11-0.55734809E+05 0.35166233E+02                   4
c8h1518    14/04/09     c  8h  15o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.22862669E+02 0.31689616E-01-0.91649681E-05 0.13050502E-08-0.74478638E-13    2
 0.39874062E+04-0.88117851E+02-0.19240386E+01 0.97982906E-01-0.78272104E-04    3
 0.37137330E-07-0.83038307E-11 0.11350982E+05 0.41476196E+02                   4
c7h1315    14/04/09     c  7h  13o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.19699223E+02 0.27305672E-01-0.77966097E-05 0.11003983E-08-0.62440192E-13    2
 0.65118008E+04-0.73263214E+02-0.65700984E+00 0.80941029E-01-0.64745480E-04    3
 0.32671579E-07-0.79607354E-11 0.12720174E+05 0.33642590E+02                   4
c7h1314    14/04/09     c  7h  13o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.19681307E+02 0.27411312E-01-0.78451139E-05 0.11086879E-08-0.62944387E-13    2
 0.64754688E+04-0.73331062E+02-0.19928926E+01 0.86210124E-01-0.71340699E-04    3
 0.35965602E-07-0.85446173E-11 0.12897562E+05 0.39839436E+02                   4
mn7d5d     14/04/09     c  10h  16o  2  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
-0.16436995E+02 0.11769226E+00-0.51913870E-04 0.99507993E-08-0.69796501E-12    2
-0.36643430E+05 0.13956267E+03-0.39922976E+01 0.13285282E+00-0.10199875E-03    3
 0.30098139E-07 0.13983095E-11-0.45429359E+05 0.56240143E+02                   4
c7h1313    14/04/09     c  7h  13o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.19708416E+02 0.27362114E-01-0.78157700E-05 0.11016896E-08-0.62367022E-13    2
 0.64644883E+04-0.73482506E+02-0.17908243E+01 0.84802791E-01-0.67949302E-04    3
 0.32574309E-07-0.73438079E-11 0.12876032E+05 0.38984554E+02                   4
c7h1312    14/04/09     c  7h  13o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.19600529E+02 0.28331429E-01-0.83007726E-05 0.11918578E-08-0.68341051E-13    2
-0.26280273E+04-0.74713295E+02-0.88093001E+00 0.77628210E-01-0.50799157E-04    3
 0.17329025E-07-0.25318979E-11 0.38295867E+04 0.33956848E+02                   4
c9h1613    14/04/09     c  9h  16o  0  0g  300.000  5000.000 1000.000          1
 0.23332375E+02 0.38568925E-01-0.12441292E-04 0.19116990E-08-0.11475253E-12    2
```

```
md8o5*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126070E+05 0.15867819E+03-0.28927109E+01 0.15822893E+00-0.12567993E-03    3
 0.41712109E-07-0.38205393E-12-0.81788164E+05 0.59171009E+02                   4
md8o4*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126070E+05 0.15867819E+03-0.28927109E+01 0.15822893E+00-0.12567993E-03    3
 0.41712109E-07-0.38205393E-12-0.81788164E+05 0.59171009E+02                   4
md7o10*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.55971541E+01 0.11633249E+00-0.47489026E-04 0.86180938E-08-0.58126063E-12    2
-0.72060062E+05 0.92250404E+02-0.24505148E+01 0.15621221E+00-0.12318385E-03    3
 0.42464404E-07-0.19052750E-11-0.78111719E+05 0.57530792E+02                   4
md7o9*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.42208309E+01 0.11378177E+00-0.46148831E-04 0.83384641E-08-0.56074486E-12    2
-0.76293031E+05 0.83967262E+02-0.26683099E+01 0.15537684E+00-0.12148487E-03    3
 0.41886665E-07-0.20539623E-11-0.81619484E+05 0.58506340E+02                   4
md7o8*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13909196E+02 0.13106300E+00-0.55261746E-04 0.10261460E-07-0.70359219E-12    2
-0.71941500E+05 0.13767404E+03-0.38978937E+01 0.15999603E+00-0.12412567E-03    3
 0.38606984E-07 0.67014764E-12-0.80825805E+05 0.64225395E+02                   4
md7o6*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13936123E+02 0.13110627E+00-0.55274908E-04 0.10261898E-07-0.70345314E-12    2
-0.71931344E+05 0.13782536E+03-0.43190050E+01 0.16290744E+00-0.13109029E-03    3
 0.45524857E-07-0.17651234E-11-0.80780648E+05 0.66010300E+02                   4
md7o5*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867767E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298611E+02                   4
md7o4*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867767E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298611E+02                   4
md7o3*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.15958133E+02 0.13436161E+00-0.56947280E-04 0.10612465E-07-0.72948998E-12    2
-0.73201461E+05 0.14956613E+03-0.55347829E+01 0.16385342E+00-0.13026538E-03    3
 0.44551989E-07-0.14719643E-11-0.82267734E+05 0.73603859E+02                   4
md6o10*o    02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.55971541E+01 0.11633249E+00-0.47489026E-04 0.86180938E-08-0.58126063E-12    2
-0.72060062E+05 0.92250237E+02-0.24505148E+01 0.15621221E+00-0.12318385E-03    3
 0.42464404E-07-0.19052750E-11-0.78111719E+05 0.57530621E+02                   4
md6o9*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.42208309E+01 0.11378177E+00-0.46148831E-04 0.83384641E-08-0.56074486E-12    2
-0.76293031E+05 0.83967094E+02-0.26683099E+01 0.15537684E+00-0.12148487E-03    3
 0.41886665E-07-0.20539623E-11-0.81619484E+05 0.58506172E+02                   4
md6o8*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17829927E+02 0.13731100E+00-0.58442802E-04 0.10922794E-07-0.75234177E-12    2
-0.71033188E+05 0.16000714E+03-0.28352721E+01 0.15782008E+00-0.12466696E-03    3
 0.40664997E-07 0.25081342E-14-0.81794180E+05 0.58927956E+02                   4
md6o7*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588431E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839119E+02                   4
md6o5*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.13936123E+02 0.13110627E+00-0.55274908E-04 0.10261898E-07-0.70345314E-12    2
-0.71931344E+05 0.13782504E+03-0.43190050E+01 0.16290744E+00-0.13109029E-03    3
 0.45524857E-07-0.17651234E-11-0.80780648E+05 0.66009972E+02                   4
md6o4*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867735E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298286E+02                   4
md6o3*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.15958133E+02 0.13436161E+00-0.56947280E-04 0.10612465E-07-0.72948998E-12    2
-0.73201648E+05 0.14956531E+03-0.54298887E+01 0.16313325E+00-0.12855271E-03    3
 0.42858055E-07-0.87731065E-12-0.82279070E+05 0.73158272E+02                   4
md6o2*o  02/24/09 therm c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1383.000         1
 4.14490479E+01 4.59669228E-02-1.60708768E-05 2.53199565E-09-1.48413577E-13    2
-9.25265192E+04-1.74790405E+02 2.67778110E+00 1.30473544E-01-8.58415659E-05    3
 2.87314513E-08-3.96320260E-12-7.83046923E+04 3.58435798E+01                   4
md5o9*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.42208309E+01 0.11378177E+00-0.46148831E-04 0.83384641E-08-0.56074486E-12    2
-0.76293031E+05 0.83967018E+02-0.26683099E+01 0.15537684E+00-0.12148487E-03    3
 0.41886665E-07-0.20539623E-11-0.81619484E+05 0.58506096E+02                   4
md5o8*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867711E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298042E+02                   4
md5o7*o     02/23/09    c  11h  19o  4  0g  300.000  5000.000 1000.000         1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
```

```
-0.71126016E+05 0.15867711E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298042E+02                   4
md5o6*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588423E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839043E+02                   4
md5o4*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13936123E+02 0.13110627E+00-0.55274908E-04 0.10261898E-07-0.70345314E-12    2
-0.71931328E+05 0.13782487E+03-0.43190050E+01 0.16290744E+00-0.13109029E-03    3
 0.45524857E-07-0.17651234E-11-0.80780641E+05 0.66009804E+02                   4
md5o3*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.15958133E+02 0.13436161E+00-0.56947280E-04 0.10612465E-07-0.72948998E-12    2
-0.73201648E+05 0.14956514E+03-0.54298887E+01 0.16313325E+00-0.12855271E-03    3
 0.42858055E-07-0.87731065E-12-0.82279070E+05 0.73158104E+02                   4
md5o2*o  02/24/09 therm c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1383.000    1
 4.14490479E+01 4.59669228E-02-1.60708768E-05 2.53199565E-09-1.48413577E-13    2
-9.25265192E+04-1.74790405E+02 2.67778110E+00 1.30473544E-01-8.58415659E-05    3
 2.87314513E-08-3.96320260E-12-7.83046923E+04 3.58435798E+01                   4
md4o8*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867711E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298035E+02                   4
md4o7*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867711E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298035E+02                   4
md4o6*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867711E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298035E+02                   4
md4o5*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588423E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839035E+02                   4
md4o3*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.12574461E+02 0.12905808E+00-0.54259566E-04 0.10053974E-07-0.68827078E-12    2
-0.73905180E+05 0.13021149E+03-0.65746026E+01 0.16580771E+00-0.12901572E-03    3
 0.41596142E-07-0.41675265E-12-0.81300977E+05 0.78812431E+02                   4
md4o2*o  02/24/09 therm c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1383.000    1
 4.14490479E+01 4.59669228E-02-1.60708768E-05 2.53199565E-09-1.48413577E-13    2
-9.25265192E+04-1.74790405E+02 1.30473544E-01-8.58415659E-05 2.87314513E-08    3
-3.96320260E-12-7.83046923E+04 3.58435798E+01                                  4
md3o7*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867717E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298103E+02                   4
md3o6*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867717E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298103E+02                   4
md3o5*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867717E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298103E+02                   4
md3o4*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867717E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298103E+02                   4
md3o3*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.17590536E+02 0.13688843E+00-0.58212187E-04 0.10872159E-07-0.74843864E-12    2
-0.71126016E+05 0.15867717E+03-0.29228477E+01 0.15843363E+00-0.12616230E-03    3
 0.42185615E-07-0.54725273E-12-0.81784867E+05 0.59298103E+02                   4
md3o2*o  02/24/09 therm c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1385.000    1
 4.19649991E+01 4.55708835E-02-1.59448684E-05 2.51353397E-09-1.47390742E-13    2
-9.21334167E+04-1.78244957E+02 4.09172755E-01 1.38259533E-01-9.45966495E-05    3
 3.29364266E-08-4.70537315E-12-7.71651698E+04 4.66603388E+01                   4
md3om*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.13080838E+02 0.85118882E-01-0.31815325E-04 0.54288880E-08-0.35071972E-12    2
-0.80189398E+05-0.12581772E+02-0.13479327E+00 0.14231494E+00-0.99071862E-04    3
 0.28018771E-07 0.26225316E-12-0.78923016E+05 0.47457592E+02                   4
md2o6*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588445E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839256E+02                   4
md2o5*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588445E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839256E+02                   4
md2o4*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.13587294E+02 0.13049202E+00-0.54940767E-04 0.10188706E-07-0.69781957E-12    2
-0.72067523E+05 0.13588445E+03-0.40433917E+01 0.16102216E+00-0.12663580E-03    3
 0.41159939E-07-0.25026753E-12-0.80810469E+05 0.64839256E+02                   4
md2o3*o  02/24/09 therm c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1386.000    1
 4.12403453E+01 4.58959920E-02-1.59896486E-05 2.51325928E-09-1.47072970E-13    2
-9.61073952E+04-1.75077731E+02 2.21838268E+00 1.33627245E-01-9.17128336E-05    3
 3.26231215E-08-4.82900236E-12-8.20730680E+04 3.59473475E+01                   4
md2om*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.70818268E+02 0.55484707E-03 0.67462935E-07-0.17759627E-10 0.14735039E-14    2
-0.10413188E+06-0.34113696E+03 0.32710197E+01 0.11922704E+00-0.55725206E-04    3
 0.48797779E-08-0.23649881E-12-0.78499961E+05 0.33114029E+02                   4
mdmo3*o    02/23/09    c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.10226299E+02 0.12257103E+00-0.50415318E-04 0.91988204E-08-0.62286591E-12    2
-0.77775211E+05 0.11714616E+03-0.85308094E+01 0.17052431E+00-0.13491561E-03    3
 0.43875215E-07-0.60951558E-12-0.83952352E+05 0.88168854E+02                   4
mdmo2*o  02/24/09 therm c  11h  19o   4    0g   300.000   5000.000 1379.000    1
 4.05515385E+01 4.67665050E-02-1.63550782E-05 2.57724086E-09-1.51084105E-13    2
-9.36992298E+04-1.70061105E+02 4.69794498E+00 1.19483111E-01-6.96695661E-05    3
 1.91179592E-08-1.93919079E-12-7.99827450E+04 2.66853971E+01                   4
mo8*o6*o    02/17/09    c  9h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.25723932E+02 0.13205793E+00-0.60467668E-04 0.11902689E-07-0.85116555E-12    2
-0.80841016E+05 0.19884888E+03-0.20951324E+01 0.12376209E+00-0.94777730E-04    3
 0.27741795E-07 0.19430980E-11-0.93403844E+05 0.55099518E+02                   4
md3oohm*o  3/ 5/ 7 thermc  11h  20o   5    0g   300.000   5000.000 1385.000   31
 4.78468333e+01 4.27212971e-02-1.45898100e-05 2.28418195e-09-1.33587162e-13    2
-1.16642728e+05-2.12213290e+02 2.77933341e+00 1.48212321e-01-1.09327665e-04    3
 4.12433660e-08-6.33363464e-12-1.01023056e+05 2.97415634e+01                   4
mdmooh3*o  3/ 5/ 7 thermc  11h  20o   5    0g   300.000   5000.000 1388.000   31
 4.68696219e+01 4.46235116e-02-1.50537538e-05 2.33171968e-09-1.35355920e-13    2
-1.19493731e+05-2.05351425e+02 2.99700664e-01 1.57676025e-01-1.21349025e-04    3
 4.83656785e-08-7.85762084e-12-1.03767043e+05 4.32183298e+01                   4
md3oohmoo  3/ 1/ 7 thermc  11h  21o   6    0g   300.000   5000.000 1386.000   01
 5.06316851e+01 4.45974311e-02-1.50480809e-05 2.34358967e-09-1.36682017e-13    2
-1.01712087e+05-2.19509038e+02 4.22433491e+00 1.54895708e-01-1.16210090e-04    3
 4.50290299e-08-7.12386100e-12-8.57838031e+04 2.90651830e+01                   4
mdmooh3oo  3/ 1/ 7 thermc  11h  21o   6    0g   300.000   5000.000 1386.000   01
 5.06316851e+01 4.45974311e-02-1.50480809e-05 2.34358967e-09-1.36682017e-13    2
-1.01712087e+05-2.19509038e+02 4.22433491e+00 1.54895708e-01-1.16210090e-04    3
 4.50290299e-08-7.12386100e-12-8.57838031e+04 2.90651830e+01                   4
mo8*o5*o    02/17/09    c  9h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.27112211E+02 0.13420653E+00-0.61578168E-04 0.12138922E-07-0.86897042E-12    2
-0.78866203E+05 0.20658282E+03 0.50800407E+00 0.11844131E-00-0.91012414E-04    3
 0.25816425E-07 0.26749015E-11-0.92920539E+05 0.40826355E+02                   4
mo8*o4*o    02/17/09    c  9h  14o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.27112211E+02 0.13420653E+00-0.61578168E-04 0.12138922E-07-0.86897042E-12    2
-0.78866203E+05 0.20658282E+03 0.50800407E+00 0.11844131E-00-0.91012414E-04    3
 0.25816425E-07 0.26749015E-11-0.92920539E+05 0.40826355E+02                   4
mhp7*o4*o   02/17/09    c  8h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28662657E+02 0.12795980E+00-0.59757946E-04 0.11930251E-07-0.86201592E-12    2
-0.75617734E+05 0.21262198E+03 0.53591490E+00 0.10789542E+00-0.87213477E-04    3
 0.27685866E-07 0.13195994E-11-0.90007500E+05 0.38920273E+02                   4
mhp7*o3*o   02/17/09    c  8h  12o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.27016539E+02 0.12532829E+00-0.58365909E-04 0.11628914E-07-0.83899478E-12    2
-0.77687367E+05 0.20346967E+03-0.20647609E+01 0.11321727E+00-0.91034257E-04    3
 0.29726939E-07 0.52393419E-12-0.90491281E+05 0.53180660E+02                   4
mhx6*o2*o   02/17/09    c  7h  10o   4    0g   300.000   5000.000 1677.000   71
 2.49501591E+01 3.08925558E-02-1.15236552E-05 1.90147877E-09-1.15228584E-13    2
-8.00625360E+04-9.33891854E+01 6.42588368E+00 6.27720332E-02-2.52125713E-05    3
 3.97866090E-10 1.23147158E-12-7.29042413E+04 9.63711869E+00                   4
mp3*om*o    02/17/09    c  4h  4o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.30021255E+01 0.46300810E-01-0.21082660E-04 0.41330308E-08-0.29464774E-12    2
-0.73088930E+05 0.60352058E+02 0.17048410E+01 0.48868570E-01-0.34190383E-04    3
 0.84729219E-08 0.10787931E-11-0.76070195E+05 0.30033592E+02                   4
pecoet      4/19/ 7    c  8h  15o   1    0g   300.000   5000.000 1388.000   71
 2.39675249e+01 3.55762539e-02-1.17102084e-05 1.76824666e-09-1.00685546e-13    2
-2.58858374e+04-9.16461387e+01 1.76646452e+00 8.63807830e-02-5.66503486e-05    3
 2.01780361e-08-3.05492666e-12-1.79905193e+04 2.80968677e+01                   4
c6h13cooh2 4/19/ 7 thermc   8h  15o   1    0g   300.000   5000.000 1385.000   61
 2.72938469e+01 3.28887498e-02-1.10954375e-05 1.70832737e-09-9.86260578e-14    2
-3.05525719e+04-1.13115071e+02 6.17164785e-01 9.33812563e-02-6.33435994e-05    3
 2.22614701e-08-3.22029673e-12-2.10795515e+04 3.08494150e+01                   4
c7h15cocho 4/19/ 7 thermc   9h  16o   2    0g   300.000   5000.000 1383.000   71
 3.09728649e+01 3.67652700e-02-1.25240813e-05 1.94185726e-09-1.12632738e-13    2
-6.26842062e+04-1.29079566e+02 1.11828866e+00 1.02438510e-01-6.68165210e-05    3
 2.20846476e-08-2.95808629e-12-5.18723860e+04 3.27667613e+01                   4
daoj3*o     4/19/ 7 thermc  10h  17o   3    0g   300.000   5000.000 1390.000   91
 3.52657932e+01 4.08437581e-02-1.37085916e-05 2.09967695e-09-1.20762658e-13    2
-7.44950486e+04-1.51410285e+02-1.08451418e+00 1.28942611e-01-9.66145109e-05    3
 3.81266944e-08-6.19602674e-12-6.21756530e+04 4.27110349e+01                   4
c5h9cho     2/12/ 7 thermc   6h  10o   1    0g   300.000   5000.000 1385.000   41
 1.85202198e+01 2.35127604e-02-7.86139392e-06 1.20267523e-09-6.91315567e-14    2
-2.36636441e+04-6.73927798e+01 1.30059014e+00 6.19190070e-02-4.03220853e-05    3
 1.36379461e-08-1.90182630e-12-1.74750111e+04 2.57789034e+01                   4
c5h9co      2/12/ 7 thermc   6h   9o   1    0g   300.000   5000.000 1385.000   41
 1.81288673e+01 2.14091608e-02-7.20275171e-06 1.10662106e-09-6.37895795e-14    2
-4.73292573e+03-6.36756659e+01 2.07919139e+00 5.70343459e-02-3.71188593e-05    3
 1.24751762e-08-1.72387954e-12 1.05458004e+03 2.32303212e+01                   4
c4h7cho     2/12/ 7 thermc   5h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1387.000   31
 1.51223866e+01 1.93571985e-02-6.42306804e-06 9.76942081e-10-5.59306700e-14    2
-1.94532054e+04-5.04731266e+01 1.48932927e+00 5.01137258e-02-3.28686275e-05    3
 1.13466064e-08-1.62850341e-12-1.45869004e+04 2.31708945e+01                   4
c4h7co      2/12/ 7 thermc   5h   7o   1    0g   300.000   5000.000 1386.000   31
 1.47320200e+01 1.72514260e-02-5.76366234e-06 8.80774370e-10-5.05824175e-14    2
-5.22842716e+02-4.67613551e+01 2.26776749e+00 4.52289889e-02-2.96653921e-05    3
 1.01833102e-08-1.45033603e-12 3.94274356e+03 2.06232674e+01                   4
c7h15coch2co 4/18/7    c  10h  17o   2    0g   300.000   5000.000 1389.000   91
 3.35217099e+01 3.98741376e-02-1.33889512e-05 2.05080712e-09-1.17944929e-13    2
-5.01461258e+04-1.41203156e+02-8.52083723e-01 1.22271604e-01-8.99397733e-05    3
 3.48745585e-08-5.58428212e-12-3.83978573e+04 4.26989032e+01                   4
c7h15coch2 5/15/ 7 thermc   9h  17o   1    0g   300.000   5000.000 1382.000   71
 2.93044300e+01 3.80339156e-02-1.28676352e-05 1.98565148e-09-1.14805626e-13    2
-3.09380441e+04-1.20300456e+02 1.29322486e+00 9.80507994e-02-6.05998236e-05    3
 1.87471093e-08-2.31052594e-12-2.06156004e+04 3.21507197e+01                   4
c7h15chco  1/29/ 7 thermc   9h  16o   1    0g   300.000   5000.000 1388.000   71
 3.05808873e+01 3.44019158e-02-1.15895930e-05 1.78445882e-09-1.03056774e-13    2
-3.94008782e+04-1.29972971e+02-4.96430628e-01 1.07691071e-01-7.81309566e-05    3
 2.95258443e-08-4.58483253e-12-2.86747788e+04 3.66941380e+01                   4
c6h13chco  1/29/ 7 thermc   8h  14o   1    0g   300.000   5000.000 1388.000   61
 2.71694680e+01 3.02049622e-02-1.01461294e-05 1.55910671e-09-8.99254963e-14    2
-3.51960810e+04-1.12985455e+02-2.97625127e-01 9.55837295e-02-7.01923868e-05    3
 2.69160551e-08-4.23984694e-12-2.57799342e+04 3.40999444e+01                   4
c5h11chco  1/29/ 7 thermc   7h  12o   1    0g   300.000   5000.000 1389.000   51
 2.37585355e+01 2.60071535e-02-8.70226240e-06 1.33368395e-09-7.67899026e-14    2
-3.09914937e+04-9.60007097e+01-9.92863740e-02 8.34775014e-02-6.22544098e-05    3
 2.43060424e-08-3.89470907e-12-2.28849944e+04 3.15081061e+01                   4
c4h9chco   1/29/ 7 thermc   6h  10o   1    0g   300.000   5000.000 1391.000   41
 2.03483802e+01 2.18079817e-02-7.25775280e-06 1.10814873e-09-6.36474395e-14    2
-2.67872419e+04-7.90203885e+01 9.83156188e-02 7.13730149e-02-5.43173267e-05    3
 2.16956426e-08-3.54932188e-12-1.99899037e+04 2.89199890e+01                   4
c3h7chco   1/29/ 7 thermc   5h   8o   1    0g   300.000   5000.000 1392.000   31
 1.68527047e+01 1.76544919e-02-5.82405647e-06 8.83874854e-10-5.05634249e-14    2
-2.25546890e+04-6.15551100e+01 2.84433435e-01 5.90700364e-02-4.60886854e-05    3
 1.89217230e-08-3.17084887e-12-1.70848350e+04 2.64449049e+01                   4
c2h3chco   2/12/ 7 thermc   4h   4o   1    0g   300.000   5000.000 1406.000   01
 1.32409996e+01 9.01512178e-03-2.78848263e-06 4.04883873e-10-2.24807599e-14    2
-4.50460071e+03-4.42110220e-01-3.20949330e-01 5.07813402e-02-5.20705695e-05    3
 2.69083548e-08-5.13667779e-12-8.35129843e+02 2.49948800e+01                   4
mpe3d5j2*o 1/30/ 9 THERMc   6h   7o   3   0G   300.000   5000.000 1369.000   41
 2.19966387E+01 1.95971789E-02-6.97336562E-06 1.11169071E-09-6.56998740E-14    2
-4.89072229E+04-8.25086392E+01 2.55566801E+00 5.82743723E-02-3.37744100E-05    3
 8.32146517E-09-5.71507644E-13-4.14593977E+04 2.43345748E+01                   4
c4h9coc3h6 4/19/ 7    c   8h  15o   1    0g   300.000   5000.000 1388.000   71
 2.39675249e+01 3.55762539e-02-1.17102084e-05 1.76824666e-09-1.00685546e-13    2
-2.58858374e+04-9.16461387e+01 1.76646452e+00 8.63807830e-02-5.66503486e-05    3
 2.01780361e-08-3.05492666e-12-1.79905193e+04 2.80968677e+01                   4
c3h5chco   2/12/ 7 thermc   5h   6o   1    0g   300.000   5000.000 1401.000   21
 1.58098432e+01 1.42319869e-02-4.34688543e-06 6.25799481e-10-3.46351058e-14    2
-6.48600281e+03-5.60059922e-01 8.58256282e-01 5.92459097e-02-5.12682471e-05    3
 2.28563931e-08-4.03985888e-12-1.58895356e+03 3.12179892e+01                   4
c6h13cooh2co  07/09    c   9h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.28858628E+01 0.84375001E-01-0.33509492E-04 0.59654708E-08-0.39695306E-12    2
-0.34988703E+05 0.66999374E+02-0.14097799E+01 0.10953296E+00-0.81649865E-04    3
 0.29498828E-07-0.25090095E-11-0.38457906E+05 0.48398739E+02                   4
c6h13cooh2o2  07/09    c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 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
c6h13cooh2o2h 07/09    c   8h  16o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 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
c6h13cooh2o   07/09    c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 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
pecoetco    07/09    c   9h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961664E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974586E+05 0.34120312E+02                   4
pecoeto2    07/09    c   8h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
 0.30688255E+01 0.71418032E-01-0.27353351E-04 0.47478355E-08-0.31039250E-12    2
-0.42663480E+05 0.20725296E+02 0.16074480E+00 0.99350087E-01-0.65468579E-04    3
 0.15679113E-07 0.17815413E-11-0.44167555E+05 0.27772417E+02                   4
pecoeto2h   7/09    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
pecoeto     07/09    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
bucoprco    7/09    c   9h  15o   2    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961664E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974586E+05 0.34120312E+02                   4
bucopr      07/09    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
bucoprco2   07/09    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
bucoprco2h  7/09    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
bucopro     07/09    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
bucoetco    07/09    c   9h  15o   3    0g   300.000   5000.000 1000.000    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
bucoetp     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
bucoeto2    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
bucoetco2h  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
bucoeto     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
c9h17-11    4/23/ 7    c   9h  17    0    0g   300.000   5000.000 1385.000   71
 2.84240897e+01 3.61113218e-02-1.21533744e-05 1.86983174e-09-1.07923538e-13    2
 3.12141626e+03-1.19433944e+02-9.08402038e-01 1.02156403e-01-6.85136340e-05    3
 2.36487053e-08-3.33905040e-12 1.35727998e+04 3.90100760e+01                   4
c8h18       7/09    c   8h  18o   0    G   0300.00   5000.00   1000.00    1
 0.13131660E+02 0.55889133E-01-0.19955618E-04 0.32973715E-08-0.20829348E-12    2
-0.32370934E+05-0.36898018E+02 0.61674851E+00 0.81949644E-01-0.21207063E-04    3
-0.21990552E-07 0.12782521E-10-0.28745311E+05 0.29298746E+02                   4
md10*o8*o   14/04/09    c  10h  18o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.22271364E+02 0.14417695E+00-0.64081301E-04 0.12348530E-07-0.86943620E-12    2
-0.87516953E+05 0.18469572E+03-0.25556960E+01 0.14765529E+00-0.10908617E-03    3
 0.30678120E-07 0.23003723E-11-0.99186531E+05 0.60626476E+02                   4
md10j*o8*o 14/04/09    c  10h  17o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.19161776E+02 0.13345252E+00-0.57239522E-04 0.10756432E-07-0.74379738E-12    2
-0.70448414E+05 0.17017862E+03-0.17915334E+01 0.14336973E+00-0.10949292E-03    3
 0.33785618E-07 0.96656960E-12-0.81458828E+05 0.58294739E+02                   4
mn9*o7*o    14/04/09    c  10h  16o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.24037216E+02 0.13815770E+00-0.62275685E-04 0.12122012E-07-0.85979027E-12    2
-0.84158227E+05 0.19200735E+03-0.23779369E+01 0.13606600E-00-0.10275395E-03    3
 0.29998720E-07 0.18520801E-11-0.96289195E+05 0.58093006E+02                   4
mn9j*o7*o   14/04/09    c  10h  15o   4    0g   300.000   5000.000 1000.000    1
-0.20928637E+02 0.12731400E+00-0.55273147E-04 0.10476688E-07-0.72896404E-12    2
-0.67069750E+05 0.17755319E+03-0.19700726E+01 0.13426998E+00-0.10920213E-03    3
 0.39189594E-07-0.16504977E-11-0.78523891E+05 0.57259987E+02                   4
c8h15-13    4/23/ 7    c   8h  15    0    0g   300.000   5000.000 1386.000   61
 2.50119425e+01 3.19143979e-02-1.07097999e-05 1.64445151e-09-9.47902360e-14    2
```

```
 7.32668305e+03-1.02441753e+02-7.08216768e-01 9.00438794e-02-6.05700533e-05    3
 2.10368091e-08-2.99372735e-12 1.64674231e+04 3.64093612e+01                   4
c8h15-14   2/ 1/ 7 thermc   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.45632770e+01 3.23508417e-02-1.10493056e-05 1.71746206e-09-9.97992309e-14    2
 7.85754331e+02-9.89073493e+01-1.75414986e-01 8.30519735e-02-4.81568722e-05    3
 1.28849876e-08-1.17772840e-12 1.01082106e+04 3.65099905e+01                   4
c8h15-15   2/ 1/ 7 thermc   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.45632770e+01 3.23508417e-02-1.10493056e-05 1.71746206e-09-9.97992309e-14    2
 7.85754331e+02-9.89073493e+01-1.75414986e-01 8.30519735e-02-4.81568722e-05    3
 1.28849876e-08-1.17772840e-12 1.01082106e+04 3.65099905e+01                   4
c8h15-16   2/ 1/ 7 thermc   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.45632770e+01 3.23508417e-02-1.10493056e-05 1.71746206e-09-9.97992309e-14    2
 7.85754331e+02-9.89073493e+01-1.75414986e-01 8.30519735e-02-4.81568722e-05    3
 1.28849876e-08-1.17772840e-12 1.01082106e+04 3.65099905e+01                   4
c8h15-17   2/ 1/ 7 thermc   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1379.000    61
 2.45632770e+01 3.23508417e-02-1.10493056e-05 1.71746206e-09-9.97992309e-14    2
 7.85754331e+02-9.89073493e+01-1.75414986e-01 8.30519735e-02-4.81568722e-05    3
 1.28849876e-08-1.17772840e-12 1.01082106e+04 3.65099905e+01                   4
c8h15-18   2/ 1/ 7 thermc   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1384.000    61
 2.47358916e+01 3.21962967e-02-1.08362640e-05 1.66714561e-09-9.62219988e-14    2
 2.25697878e+03-1.00038900e+02-8.55331623e-01 8.89816811e-02-5.82433425e-05    3
 1.94353684e-08-2.63024079e-12 1.14578938e+04 3.84908799e+01                   4
c5h8-14    2/ 1/ 7 thermc   5h   8    0    0g   300.000  5000.000 1393.000    21
 1.37306396e+01 1.85661231e-02-5.90494325e-06 8.73025310e-10-4.91089721e-14    2
 5.91146322e+03-4.78447027e+01-2.16682895e+00 5.71713770e-02-4.17937839e-05    3
 1.60477980e-08-2.50766108e-12 1.12317905e+04 3.69252259e+01                   4
c6h11-16   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
c8h14-17   2/ 2/ 7 thermc   8h  14    0    0g   300.000  5000.000 1387.000    51
 2.39434396e+01 3.06418998e-02-1.02556869e-05 1.57252563e-09-9.05762403e-14    2
-6.80931469e+03-9.74357489e+01-1.95150769e+00 9.01374097e-02-6.23261445e-05    3
 2.22952068e-08-3.26473627e-12 2.27740597e+03 4.19826404e+01                   4
mn8d6d     01/09/09     c  10h  16o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.19278543E+02 0.12308474E+00-0.54919456E-04 0.10613265E-07-0.74885833E-12    2
-0.34084773E+05 0.15588191E+03-0.39805229E+01 0.13436978E+00-0.10489789E-03    3
 0.31784506E-07 0.12093318E-11-0.44050281E+05 0.56364475E+02                   4
mecoprco   01/09/09     c   6h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
ch3coc3h6  01/09/09     c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 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
mpe5oo2*o  05/12/08     c   6h   9o   5    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.18299141E+02 0.95866866E-01-0.42616819E-04 0.82140295E-08-0.57845829E-12    2
-0.57592543E+05 0.15475510E+03-0.23713565E+01 0.10292790E+00-0.89375841E-04    3
 0.31902896E-07-0.69939280E-12-0.67362539E+05 0.53182274E+02                   4
mpe5o2*o   05/12/08     c   6h   9o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.20531261E+02 0.95603488E-01-0.42704727E-04 0.82586382E-08-0.58298906E-12    2
-0.56822598E+05 0.16327866E+03-0.37007763E+01 0.98413095E-01-0.84429514E-04    3
 0.30286653E-07-0.73813270E-12-0.66625602E+05 0.57766689E+02                   4
mhx3d-z   12/01/10      c   7h  12o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.41010998E+02-0.73699909E-02 0.91540323E-05-0.24142508E-08 0.20164493E-12    2
-0.63682473E+05-0.18434100E+03-0.15790458E+01 0.65466940E-01-0.20621093E-04    3
-0.37089636E-08 0.13089492E-11-0.47483637E+05 0.52065952E+02                   4
mhx3dmj    (mhx4dmj)    c   7h  11o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.11566426E+02 0.41918866E-01-0.14469623E-04 0.23367843E-08-0.14540504E-12    2
-0.26793354E+05-0.19423141E+02-0.58472067E+00 0.91531232E-01-0.81692735E-04    3
 0.39657394E-07-0.77158306E-11-0.24856754E+05 0.37965599E+02                   4
mhx3d2oo   13/01/10     c   7h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.27717316E+05 0.64022011E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.27717316E+05 0.64022011E+02                   4
mhx4d3oo   13/01/10     c   7h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.92235661E+01 0.54272149E-01-0.20166823E-04 0.34261654E-08-0.22061473E-12    2
-0.43869699E+05-0.88388824E+00 0.51297760E+00 0.99082761E-01-0.77590645E-04    3
 0.25279602E-07-0.79525221E-12-0.43771574E+05 0.36047203E+02                   4
mhx3d5oo   13/01/10     c   7h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.39229984E+05 0.64022346E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.39229984E+05 0.64022346E+02                   4
mhx2d4oo   13/01/10     c   7h  11o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.23614125E+01 0.72770551E-01-0.29275976E-04 0.52595195E-08-0.35225441E-12    2
-0.39626879E+05 0.64124962E+02-0.83572167E+00 0.10308636E+00-0.84005544E-04    3
 0.28359572E-07-0.65011348E-12-0.43782723E+05 0.43009285E+02                   4
mhx3d2ooh   13/01/10     c   7h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46959564E+02-0.71305470E-02 0.95239257E-05-0.25616511E-08 0.21591581E-12    2
-0.81435977E+05-0.21274045E+03 0.12266964E+00 0.73442504E-01-0.24883602E-04    3
-0.20998374E-08 0.73887391E-12-0.63636477E+05 0.47143414E+02                   4
mhx4d3ooh   13/01/10     c   7h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.69827790E+01 0.61417479E-01-0.24273166E-04 0.43065009E-08-0.28587994E-12    2
-0.60843562E+05 0.12166519E+02 0.17179825E+01 0.96058927E-01-0.68929818E-04    3
 0.17690349E-07 0.15416338E-11-0.61725402E+05 0.31303164E+02                   4
mhx3d5ooh   13/01/10     c   7h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.46959564E+02-0.71305470E-02 0.95239257E-05-0.25616511E-08 0.21591581E-12    2
-0.77808055E+05-0.21706015E+03 0.12266964E+00 0.73442504E-01-0.24883602E-04    3
-0.20998374E-08 0.73887391E-12-0.60008555E+05 0.42823719E+02                   4
mhx2d4ooh   13/01/10     c   7h  12o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.49344802E+01 0.80827281E-01-0.34130378E-04 0.63434817E-08-0.43520041E-12    2
-0.56522070E+05 0.78869728E+02 0.30489272E+00 0.10049921E+00-0.76371842E-04    3
 0.21776746E-07 0.13361960E-11-0.61729512E+05 0.38538960E+02                   4
mhx3d2o    13/01/10     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.37480961E+05 0.59432152E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.37480961E+05 0.59432152E+02                   4
mhx4d3o    13/01/10     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.67869053E+01 0.54251995E-01-0.20293699E-04 0.34632648E-08-0.22367447E-12    2
-0.41945496E+05 0.88305740E+01-0.91196918E+00 0.95213994E-01-0.74146861E-04    3
 0.25105955E-07-0.13226460E-11-0.41967445E+05 0.41037605E+02                   4
mhx3d5o    13/01/10     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.37997332E+05 0.59432457E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.37997332E+05 0.59432457E+02                   4
mhx2d4o    13/01/10     c   7h  11o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
-0.47020817E+01 0.72624184E-01-0.29368879E-04 0.52946789E-08-0.35544563E-12    2
-0.37746176E+05 0.73286697E+02-0.23307605E+01 0.99714398E-01-0.81785780E-04    3
 0.29441622E-07-0.16345526E-11-0.41971219E+05 0.48295223E+02                   4
c5h913oo   25/01/10     c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.19640825E+02 0.17775692E-01-0.47374442E-05 0.63687738E-09-0.35002949E-13    2
-0.49925996E+04-0.71976242E+02 0.18928568E+00 0.67763723E-01-0.49066417E-04    3
 0.15915267E-07-0.15236338E-11 0.71937573E+03 0.29846054E+02                   4
c5h913ooh  25/01/10     c   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.18899086E+02 0.21651655E-01-0.65848512E-05 0.96975394E-09-0.56508363E-13    2
-0.22455904E+05-0.66268036E+02 0.15029547E+01 0.63981958E-01-0.38576381E-04    3
 0.64933117E-08 0.14637689E-11-0.17246027E+05 0.25344387E+02                   4
c5h913o    25/01/10     c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.16583792E+02 0.18606793E-01-0.51234592E-05 0.70336487E-09-0.39109310E-13    2
-0.27957070E+04-0.58711937E+02-0.12582802E+01 0.63986443E-01-0.45627672E-04    3
 0.15481454E-07-0.18552508E-11 0.25266528E+04 0.34937195E+02                   4
c5h924ooh  25/01/10     c   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.18574663E+02 0.21872206E-01-0.66599951E-05 0.98338826E-09-0.57497294E-13    2
-0.24044348E+05-0.64894997E+02 0.23808618E+01 0.60078640E-01-0.35350546E-04    3
 0.69815331E-08 0.61347444E-12-0.19023979E+05 0.20939533E+02                   4
c5h924o    25/01/10     c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.16311857E+02 0.18736243E-01-0.51462293E-05 0.70465328E-09-0.39081500E-13    2
-0.44056914E+04-0.57631821E+02-0.35223070E+00 0.59886672E-01-0.41927498E-04    3
 0.15494786E-07-0.25372753E-11 0.74570935E+03 0.30414333E+02                   4
c5h924oo   25/01/10     c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.19352961E+02 0.17933387E-01-0.47767044E-05 0.64200439E-09-0.35285305E-13    2
-0.65962148E+04-0.70807617E+02 0.11089664E+01 0.63574053E-01-0.45160654E-04    3
 0.15732038E-07-0.21385409E-11-0.10630948E+04 0.25264542E+02                   4
c5h931ooh  25/01/10     c   5h  10o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.11113869E+02 0.33499304E-01-0.11911375E-04 0.19620010E-08-0.12364621E-12    2
-0.18570068E+05-0.23348305E+02 0.34559107E+00 0.66596963E-01-0.43444088E-04    3
 0.10342406E-07 0.67595105E-12-0.16094735E+05 0.30711651E+02                   4
c5h931o    25/01/10     c   5h   9o   1    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.10353563E+02 0.27676189E-01-0.89362393E-05 0.13755771E-08-0.82753371E-13    2
-0.56088281E+03-0.24412849E+02-0.21136441E+01 0.64587988E-01-0.45918077E-04    3
 0.15075269E-07-0.12584609E-11 0.25879214E+04 0.39014046E+02                   4
c5h931oo   25/01/10     c   5h   9o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.12652088E+02 0.27955154E-01-0.89563591E-05 0.13702368E-08-0.82040088E-13    2
-0.13780098E+04-0.33365318E+02-0.76770163E+00 0.68984181E-01-0.50574748E-04    3
 0.16403908E-07-0.11202664E-11 0.18492893E+04 0.34363804E+02                   4
mb3d4j     22/01/10     c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.92149980E+04 0.48240875E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.92149980E+04 0.48240875E+02                   4
c4h7-1     22/01/10     c   4h   7o   0    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 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
c4h7-1     22/01/10     c   4h   7o   0    0g   300.000  5000.000 1379.000    41
 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
prcoet-1o2      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
prcoet-1o2h      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
prcoet-1o       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
c4h7-3     2/14/95 thermc   4h   7    0    0g   300.000  5000.000 1392.000    11
 1.12103578e+01 1.60483196e-02-5.46502292e-06 8.45941053e-10-4.89772739e-14    2
 1.09041937e+04-3.55593015e+01-3.50508352e-01 4.26511243e-02-2.90979373e-05    3
 1.05403914e-08-1.60059854e-12 1.49933591e+04 2.67295696e+01                   4
c4h7-4                  c   4h   70   00   0G   300.00   3000.00  1000.00      1
 0.11184356E+02 0.14457868E-01-0.44852630E-05 0.73693834E-09-0.48752824E-13    2
 0.17987671E+05-0.32095703E+02 0.21544552E+01 0.21568453E-01 0.29077822E-04    3
-0.54719830E-07 0.23710092E-10 0.21387008E+05 0.18934394E+02 0.23147967E+05    4
hoc2h4o2                c   2h   5o   3    0G   300.000  5000.000 1395.00      1
 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
ch3coc3h6o     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
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
prcopr-1        04/02/10 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
c3h6co     19/03/10     c   4h   6o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    61
 0.94122343E+01 0.10699163E-01-0.24235674E-05 0.28989780E-09-0.14769456E-13    2
-0.76320991E+04-0.36443127E+02-0.43060538E+00 0.32458965E-01-0.17522470E-04    3
 0.31551493E-08 0.30062357E-12-0.44155840E+04 0.16304520E+02                   4
c8h15      11/03/10     c   8h  15    0    0g   300.000  5000.000 1000.000    61
 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
c9h19-4        11/03/10    c   9h  19o   0    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.26060333E+02 0.40333696E-01-0.11825125E-04 0.16999763E-08-0.97626314E-13    2
-0.16370930E+05-0.10367323E+03-0.22578375E+01 0.11566918E+00-0.90114809E-04    3
 0.42306123E-07-0.94330958E-11-0.79083804E+04 0.44549618E+02                   4
non1o2         11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.26430988E+02 0.44499055E-01-0.13610530E-04 0.20168971E-08-0.11826095E-12    2
-0.41446066E+05-0.11233928E+03-0.59825951E+00 0.10794666E+00-0.59445963E-04    3
 0.90595993E-08 0.22350552E-11-0.33093480E+05 0.30906380E+02                   4
non2o2         11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49943081E+02 0.10749383E-01-0.14609774E-05 0.11439055E-09-0.42140893E-14    2
-0.53946602E+05-0.24657864E+03 0.11417654E+01 0.99525534E-01-0.43943739E-04    3
 0.62061944E-09 0.19903504E-11-0.35897910E+05 0.22326769E+02                   4
non3o2         11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49943081E+02 0.10749383E-01-0.14609774E-05 0.11439055E-09-0.42140893E-14    2
-0.53674859E+05-0.24657864E+03 0.11417654E+01 0.99525534E-01-0.43943739E-04    3
 0.62061944E-09 0.19903504E-11-0.35626168E+05 0.22326769E+02                   4
non4o2         11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.49943081E+02 0.10749383E-01-0.14609774E-05 0.11439055E-09-0.42140893E-14    2
-0.53674859E+05-0.24657864E+03 0.11417654E+01 0.99525534E-01-0.43943739E-04    3
 0.62061944E-09 0.19903504E-11-0.35626168E+05 0.22326769E+02                   4
non1o2h3j      11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.29605568E+02 0.41805007E-01-0.12222919E-04 0.17559202E-08-0.10091011E-12    2
-0.27422979E+05-0.11362704E+03-0.52602607E+00 0.12587106E+00-0.10229057E-03    3
 0.48095451E-07-0.10304425E-10-0.18846041E+05 0.42586773E+02                   4
non2o2h4j      11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52176769E+02 0.99439938E-02-0.12386784E-05 0.90972098E-10-0.32409115E-14    2
-0.39594336E+05-0.24274733E+03 0.10758094E+01 0.11839948E+00-0.89050838E-04    3
 0.41901604E-07-0.11340823E-10-0.21635539E+05 0.34593719E+02                   4
non3o2h1j     11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52563820E+02 0.98547451E-02-0.12439663E-05 0.95292170E-10-0.36747796E-14    2
-0.38403750E+05-0.24518448E+03 0.14090639E+01 0.11512641E+00-0.78553865E-04    3
 0.30655521E-07-0.73632359E-11-0.20283002E+05 0.33216480E+02                   4
non3o2h5j     11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
non4o2h2j     11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.52087082E+02 0.10116814E-01-0.12732683E-05 0.93563692E-10-0.32948146E-14    2
-0.39329977E+05-0.24234097E+03 0.21854873E+01 0.11054188E+00-0.71320588E-04    3
 0.25530634E-07-0.58972059E-11-0.21472293E+05 0.29960089E+02                   4
non1o2h3o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.53620670E+02 0.11968574E-01-0.17116486E-05 0.14177101E-09-0.55583776E-14    2
-0.64775355E+05-0.25795660E+03 0.28175607E+01 0.11009908E+00-0.56974943E-04    3
 0.72325430E-08 0.83684378E-12-0.46557574E+05 0.19905790E+02                   4
non2o2h4o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.17247450E+02 0.67335054E-01-0.23805160E-04 0.39054058E-08-0.24544654E-12    2
-0.51938547E+05-0.52366196E+02 0.14756096E-01 0.12727496E+00-0.84511732E-04    3
 0.19431569E-07 0.21782567E-11-0.48806559E+05 0.31305101E+02                   4
non3o2h1o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.53660957E+02 0.11898126E-01-0.16709022E-05 0.13222103E-09-0.47787617E-14    2
-0.64791805E+05-0.25748886E+03 0.28290665E+01 0.11003380E+00-0.56852117E-04    3
 0.71396102E-08 0.86101552E-12-0.46559020E+05 0.20548092E+02                   4
non3o2h5o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.17247450E+02 0.67335054E-01-0.23805160E-04 0.39054058E-08-0.24544654E-12    2
-0.51666809E+05-0.52366196E+02 0.14756096E-01 0.12727496E+00-0.84511732E-04    3
 0.19431569E-07 0.21782567E-11-0.48534820E+05 0.31305101E+02                   4
non4o2h2o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.17247450E+02 0.67335054E-01-0.23805160E-04 0.39054058E-08-0.24544654E-12    2
-0.51938547E+05-0.51673119E+02 0.14756096E-01 0.12727496E+00-0.84511732E-04    3
 0.19431569E-07 0.21782567E-11-0.48806559E+05 0.31998177E+02                   4
non3o2h1*o    11/03/10    c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
non4o2h2*o    11/03/10    c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
non1o2h3*o    11/03/10    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
non5o2h3*o    11/03/10    c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
non2o2h4*o    11/03/10    c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     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
non2o2h5*o    11/03/10    c   9h  18o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.94122343E+01 0.10699163E-01-0.24235674E-05 0.28989780E-09-0.14769456E-13    2
-0.76320991E+04-0.36443127E+02-0.43060538E+00 0.32458965E-01-0.17522470E-04    3
 0.31551493E-08 0.30062357E-12-0.44155840E+04 0.16304520E+02                   4
non5o2h2j     11/03/10    c   9h  19o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.94122343E+01 0.10699163E-01-0.24235674E-05 0.28989780E-09-0.14769456E-13    2
-0.76320991E+04-0.36443127E+02-0.43060538E+00 0.32458965E-01-0.17522470E-04    3
 0.31551493E-08 0.30062357E-12-0.44155840E+04 0.16304520E+02                   4
non5o2h2o2    11/03/10    c   9h  19o   4    0g   300.000  5000.000 1000.000     1
 0.94122343E+01 0.10699163E-01-0.24235674E-05 0.28989780E-09-0.14769456E-13    2
-0.76320991E+04-0.36443127E+02-0.43060538E+00 0.32458965E-01-0.17522470E-04    3
 0.31551493E-08 0.30062357E-12-0.44155840E+04 0.16304520E+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
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
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
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
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
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
nc4h9coc3h6o  07/09     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
nc4h9coc2h4co 07/09     c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
nc3h7coc3h6co     c   8h  13o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    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
c5h11coc2h4 4/19/ 7     c   8h  15o   1    0g   300.000  5000.000 1388.000   71
 2.39675249e+01 3.55762539e-02-1.17102084e-05 1.76824666e-09-1.00685546e-13    2
-2.58858374e+04-9.16461387e+01 1.76646452e+00 8.63807830e-02-5.66503486e-05    3
 2.01780361e-08-3.05492666e-12-1.79905193e+04 2.80968677e+01                   4
c5h11coc2h4o2 07/09     c   8h  15o   3    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.30688255E+01 0.71418032E-01-0.27353351E-04 0.47478355E-08-0.31039250E-12    2
-0.42663480E+05 0.20725296E+02 0.16074480E+00 0.99350087E-01-0.65468579E-04    3
 0.15679113E-07 0.17815413E-11-0.44167555E+05 0.27772417E+02                   4
c5h11coc2h4o2h 7/09     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
c5h11coc2h4o  07/09     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
nc4h9coc3h6   07/09     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 07/09     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 7/09     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
c5h11coc2h4co 07/09     c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961664E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974586E+05 0.34120312E+02                   4
nc4h9coc3h6co  7/09     c   9h  15o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
-0.43717647E+01 0.86603023E-01-0.34589499E-04 0.61817373E-08-0.41244764E-12    2
-0.32961664E+05 0.75319054E+02 0.11950926E+01 0.10418519E+00-0.77782315E-04    3
 0.27434101E-07-0.17149812E-11-0.37974586E+05 0.34120312E+02                   4
c8h16oh2j1 2/22/ 7 thermc   8h  17o   1    0g   300.000  5000.000 1386.000   81
 2.82591844e+01 3.57532963e-02-1.19655799e-05 1.83377640e-09-1.05566783e-13    2
-3.46507779e+04-1.15913007e+02-5.91529258e-01 1.01994265e-01-7.01227895e-05    3
 2.51670912e-08-3.72727502e-12-2.44950177e+04 3.94809775e+01                   4
mb3d2j     09/10/09     c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.59027267E+01 0.32500792E-01-0.11478989E-04 0.18819817E-08-0.11822697E-12    2
-0.28243164E+05 0.59051514E+01-0.40382247E-01 0.61475903E-01-0.51410920E-04    3
 0.21678419E-07-0.30342959E-11-0.27842861E+05 0.32079746E+02                   4
mb3dmj     09/10/09     c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.14599330E+05 0.48750938E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.14599330E+05 0.48750938E+02                   4
mb2dmj     09/10/09     c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.62555208E+01 0.30936021E-01-0.10612790E-04 0.17050683E-08-0.10564235E-12    2
-0.19541287E+05 0.59768295E+01 0.20098723E+00 0.64637899E-01-0.64952845E-04    3
 0.36589501E-07-0.83036399E-11-0.19305850E+05 0.31689573E+02                   4
mb2d3j     13/10/09     c   5h   7o   2    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.62555208E+01 0.30936021E-01-0.10612790E-04 0.17050683E-08-0.10564235E-12    2
-0.19541287E+05 0.59768295E+01 0.20098723E+00 0.64637899E-01-0.64952845E-04    3
 0.36589501E-07-0.83036399E-11-0.19305850E+05 0.31689573E+02                   4
ch2cco     09/10/09     c   3h   2o   1    0g   300.000  5000.000 1000.000    1
 0.94122343E+01 0.10699163E-01-0.24235674E-05 0.28989780E-09-0.14769456E-13    2
-0.76320991E+04-0.36443127E+02-0.43060538E+00 0.32458965E-01-0.17522470E-04    3
 0.31551493E-08 0.30062357E-12-0.44155840E+04 0.16304520E+02                   4
c5h9-15    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

end
```

Casimir TOGBE

Etude cinétique de l'oxydation de constituants de biocarburants et composés modèles - Formation de polluants

Pour faire face à l'épuisement des combustibles fossiles conventionnels et aux préoccupations environnementales dont le réchauffement climatique, de nouveaux carburants issus de la biomasse sont utilisés purs ou comme co-carburants ; d'autres sont envisagés pour le futur. Une meilleure connaissance de la cinétique chimique d'oxydation des composés présents dans ces carburants alternatifs est indispensable. L'objectif de cette thèse est donc d'obtenir de nouvelles bases de données expérimentales et d'élaborer des mécanismes cinétiques d'oxydation des constituants de ces nouveaux carburants. Des molécules de deux familles chimiques, à savoir les esters méthyliques et les alcools, ont été sélectionnées. L'oxydation de ces composés purs ou en mélanges a été étudiée en réacteur auto-agité à haute pression (10 atm) et dans un large domaine de températures (530-1250 K) et de richesses (ca. 0,3-4). Les profils de concentration des réactifs, produits et principaux intermédiaires stables ont été obtenus par spectroscopie d'absorption infrarouge à transformée de Fourier (IRTF) et chromatographie en phase gazeuse (GC-FID-TCD-MS). Les résultats obtenus ont permis de proposer des modèles cinétiques permettant de simuler avec un bon accord une grande partie des résultats expérimentaux obtenus au cours de cette thèse. Les analyses cinétiques ont permis de déterminer les principales voies de consommation de ces composés (principalement des mécanismes de peroxydation-isomérisation à basse température et de métathèse puis décomposition par β-scission à haute température). Elles ont permis d'identifier les réactions les plus influentes (réactions de métathèse et réactions impliquant particulièrement les composés de la base C_0-C_2).

Mots clés : biocarburants, polluants, réacteur auto-agité, cinétique, combustion, mélanges, modélisation

Kinetic study of oxidation of constituents of biofuels and compounds-Pollutants formation

To overcome the problems of conventional fossil fuels depletion and environmental issues including global warming, new fuels derived from biomass are used pure or in blends; others are proposed for the future. A good knowledge of the chemical kinetics of oxidation of components present in these alternative fuels is necessary. The aim of this work is to obtain a new experimental database and to build a chemical kinetic reaction mechanism for the combustion of these new fuels. Molecules of two functional groups were chosen: methyl esters and alcohols. The kinetics of oxidation of these compounds were studied in a Jet-Stirred Reactor at high-pressure (10 atm), over the temperature range 530-1250 K, for several equivalences ratios (ca. 0.3-4) Concentration profiles of reactants, products and main stable intermediates were obtained by probe sampling and FTIR (Fourier transform infrared spectroscopy) and GC-FID-TCD-MS analyses. The results allowed proposing detailed kinetics models that successfully simulate concentration profiles determined by Jet-Stirred Reactor method. The kinetic analyses allowed delineating the main oxidation paths of consumption (peroxidation-isomerisation at low temperature and beyond, metathesis followed by beta-scission decomposition), and identifying the most influencing reactions for the oxidation rate of the fuels, i.e. metathesis reactions with C0-C2 species.

Keywords: biofuels, pollutants, jet stirred reactor, kinetics, combustion, mixtures, modelling.

Institut de Combustion, Aérothermique, Réactivité et Environnement
1 C Avenue de la Recherche Scientifique
45071 Orléans Cedex 2