

!VERSION: 15\_50\_1112

!AUTHORS: C3

!NOTE: SPECIES RE-ARRANGED AS THE SAME ORDER IN MECH, ANALOGIES  
HAVE BEEN INDICATED BY CORRESPONDING SPECIES NAME IN COMMENTS. DATA  
MOSTLY FROM ARAMCO MECH 1.3

AR		0	136.500	3.330	0.000
0.000	0.000 !				
N2		1	97.530	3.621	0.000
1.760	4.000 !				
HE		0	10.200	2.576	0.000
0.000	0.000 !				
H2		1	38.000	2.920	0.000
0.790	280.000 !				
H		0	145.000	2.050	0.000
0.000	0.000 !				
O2		1	107.400	3.458	0.000
1.600	3.800 !				
O		0	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
H2O		2	572.400	2.605	1.844
0.000	4.000 !				
OH		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
OHV		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
H2O2		2	107.400	3.458	0.000
0.000	3.800 !				
H02		2	107.400	3.458	0.000
0.000	1.000 !				
CO		1	98.100	3.650	0.000
1.950	1.800 !				
CO2		1	244.000	3.763	0.000
2.650	2.100 !				
HOCO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
CH4		2	141.400	3.746	0.000
2.600	13.000 !				
CH3		1	144.000	3.800	0.000
0.000	0.000 !				
CH2		1	144.000	3.800	0.000
0.000	0.000 !				
CH2(S)		1	144.000	3.800	0.000
0.000	0.000 !				
C		0	71.400	3.298	0.000
0.000	0.000 !				
CH		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
CHV		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
CH3O2H		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH3O2		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH2O2H		2	238.400	3.496	0.000

0.000	1.500 !				
CH3OH		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH3O		2	417.000	3.690	1.700
0.000	2.000 !				
CH2OH		2	417.000	3.690	1.700
0.000	2.000 !				
CH2O		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
HCO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	0.000 !				
HCOH		2	498.000	3.590	0.000
0.000	1.000 !				
HO2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HOCH2O2H		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
HOCH2O2		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
OCH2O2H		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
HOCH2O		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
O2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HOCHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
OCHO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
C2H6		2	247.500	4.350	0.000
0.000	1.500 !				
C2H5		2	247.500	4.350	0.000
0.000	1.500 !				
C2H5O2H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H5O2		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H4		2	238.400	3.496	0.000
0.000	1.500 !				
C2H3		2	265.300	3.721	0.000
0.000	1.000 !				
CHOCHO		1	440.200	4.010	0.000
0.000	2.000 !				
C2H3OOH		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
C2H3OO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CHCHO	!CH3CO2	2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
C2H2	!HCCOH	1	265.300	3.721	0.000
0.000	2.500 !				
C2H		1	265.300	3.721	0.000
0.000	2.500 !				
H2CC		2	209.000	4.100	0.000

0.000	2.500 !				
C2H50H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H50		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
PC2H40H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
SC2H40H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
O2C2H40H		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
C2H402H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H401-2		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
C2H301-2		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
O2CH2CHO		2	275.049	5.428	0.000
0.000	1.000 !				
H02CH2CO		2	279.007	5.505	1.300
0.000	1.000 !				
C2H30H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H20H		2	224.700	4.162	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HCCO		2	150.000	2.500	0.000
0.000	1.000 !				
HCCOH		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO3H		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO3		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO2		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3OCH3		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH3OCH2		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH3OCH2O2H		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH3OCH2O2		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH2OCH2O2H		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
O2CH2OCH2O2H		2	395.000	4.037	1.300

0.000	1.000 !				
H02CH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
OCH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
HOCH20CO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CH20		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
C3H8		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H7		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H7		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H702H		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
NC3H702		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H702H		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H702		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
NC3H70		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H70		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-2		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-3		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H2-1		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-202		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-302		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H2-102		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3KET12		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3KET13		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H51-2,300H		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
C3H52-1,300H		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
C3H501-200H-3		2	464.200	5.009	2.600

0.000	1.000	!C3KET12				
C3H501-300H-2			2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000	!C3KET12				
C3H601-2			2	403.600	4.968	2.000
0.000	1.000	!				
C3H601-3			2	403.600	4.968	2.000
0.000	1.000	!				
C3H6			2	307.800	4.140	0.000
0.000	1.000	!				
C3H5-A			2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000	!				
C3H5-S			2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000	!				
C3H5-T			2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000	!				
CC3H6			2	307.800	4.140	0.000
0.000	1.000	!C3H6				
C3H50			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!				
CH2CHOCH2			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!C3H50				
CH3CHCHO			2	387.860	4.687	0.000
0.000	0.000	!				
AC4H700H			2	330.435	5.741	0.000
0.000	1.000	!				
C3H60H1-2			2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000	!				
CH3CHCO			2	443.200	4.120	0.000
0.000	1.000	!				
AC3H500H			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!				
C3H60H2-1			2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000	!				
HOC3H602			2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000	!1109				
CH2OHCCH3			2	503.072	5.339	1.670
7.016	1.000					
SC3H50H			2	304.276	5.450	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H50H			2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000	!				
C3H50H			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!				
CH2CCH2OH			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!				
C3H4-P			1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000	!				
C3H4-A			1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000	!				
C3H3			1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000	!				
CC3H4			1	252.000	4.760	0.000
0.000	1.000	!				
C3H2			2	209.000	4.100	0.000

0.000	1.000 !				
H2CCC(S)		2	265.300	3.721	0.000
0.000	1.000 !				
C3H2(S)		2	209.000	4.100	0.000
0.000	1.000 !				
C3H2C		1	290.616	4.368	0.000
0.000	1.000 !				
PC3H40H-2		2	300.783	5.377	0.000
0.000	1.000 !				
SC3H40H		2	298.893	5.345	0.000
0.000	1.000 !				
C3H30		2	301.263	5.055	0.000
0.000	1.000 !				
C3H302H		2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000 !				
C2HCHO		2	343.033	4.884	0.000
0.000	1.000 !				
C2H5CHO		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C2H5CO		2	424.600	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CH2CHO		2	424.600	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
C2H3CHO		2	428.800	4.958	2.900
0.000	1.000 !				
C2H3CO		2	443.200	4.120	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH3		2	435.500	4.860	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH2		2	435.500	4.860	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH2O2		2	502.115	5.429	0.000
0.000	0.000 !				
CH3COCH2O		2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000 !				
C3KET21		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C4H10		2	350.900	5.206	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H9		2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H9		2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H90		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H90		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H902		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H902		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H902H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H902H		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000 !				
C4H800H1-2		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-1		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-2		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H802-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-202		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-302		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-402		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-102		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-302		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-402		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H71-2,400H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H72-1,300H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H72-1,400H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H71-2,300H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H701-300H-4		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H701-300H-2		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H701-200H-4		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H701-400H-2		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H701-200H-3		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H702-300H-1		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !NC4KET12				
C4H72-100H		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!C4H802-3				
NC4KET12			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET13			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET14			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET21			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET23			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET24			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
C4H71-300H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H802-3				
C4H71-3,400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
C4H72-3,400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H02CH2CHO			2	275.049	5.428	0.000
0.000	1.000	!02CH2CHO				
IC4H10			2	335.700	5.208	0.100
0.000	1.000	!				
IC4H9			2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000	!				
TC4H9			2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000	!				
TC4H90			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
IC4H90			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
IC4H80			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H7CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H7CO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H6CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
TC3H6CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H5CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
TC3H602CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H502HCHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
TC3H602HCO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
TC3H60CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H6CO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H5CO			2	436.400	5.352	0.000



0.000	1.000 !				
IC3H4CHO-A		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H5CO					
SC4H70H-I		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H80					
IC4H902		2	502.252	5.430	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H902		2	502.252	5.430	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H802H-I		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
IC4H802H-T		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
TC4H802H-I		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
CC4H80		2	444.197	5.063	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H800H-I02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H800H-T02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H800H-I02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4KETII		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
IC4KETIT		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
TIC4H7Q2-I		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IIC4H7Q2-I		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IIC4H7Q2-T		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H700H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H902H		2	505.540	5.450	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H902H		2	505.540	5.450	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H8		2	344.500	5.089	0.500
0.000	1.000 !				
IC4H7		2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H7-I1		2	380.022	4.633	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H702		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H60CHO					
IC4H600H-I		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H60CHO					
CCYCC00C-T1		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H60CHO					
C2CYC00C-I1		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H60CHO					
IC4H70		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!				
CVCYCCOC			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC3H6C0				
CCYC20C0			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
CCYCC00C-I2			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
CH0IC3H60			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
IC3H500CH2			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
CCYCC0-T1			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!C3H50				
IC4H80H-IT			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
IC4H80H-TI			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
IC4H70H			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!				
IC4H80H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
IC4H60H			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!				
TQJC4H80H			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
TQC4H80I			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
QC4H70HP			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
TQC4H70HI			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
CCY(CCO)COH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
C2CY(COC)OH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
IQJC4H80H			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
IC3H60HCH0			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
IQC4H80T			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
IQC4H70HT			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
CCY(CCO)OH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
CH2COHCH200H			2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000	!C3KET12				
TC3H60H			2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000	!				
TQC4H70HI02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HT02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HIQ-I			2	523.200	5.664	1.700

0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HIQ-P			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IC3H5COHQ			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
CH2CQC0HQ			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
IC3H5Q			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!AC3H500H				
COHQCYC(COC)			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
QCYC(CCOC)OH			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
HOCOCQ(CH3)2			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
IQC4H70HT02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IQC4H80TQ-I			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IQC4H70HTQ-P			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
CHOC(CH3)OHCH2Q			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
CO(CH200H)2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
CH3COCHO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H302H				
IC3H50CH2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H70				
IC4H700CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IC4H700IC4H7			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H8-1			2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000	!				
C4H8-2			2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-1			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-2			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-3			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-4			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H72-2			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-0			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
PC4H80H-2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
SC4H80H-1			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
SC4H80H-3			2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!PC4H90				
C4H71-30H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
C4H71-40H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
C4H71-10H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
C4H71-20H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
C4H72-10H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
C4H72-20H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H80				
SQC4H80P			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
PQC4H80S			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
PQC4H70HS-3			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
NC4KET120H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
SQC4H70HS-4			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
SQC4H80S			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
NC4KET230H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
SC4H80H-302			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
CCY(COCC)0H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
C4H702-1			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
C4H6-1			2	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000	!C4H6				
AC3H50CH2			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!SC3H50CH2				
C5H10-2			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
CC5H10			2	437.102	5.017	0.000
0.000	0.000	!				
C6H10D24			2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000	!C6H10				
C5H91-3			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
C5H92-4			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
C5H92-5			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
C5H91-4			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
C5H91-5			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!				
C5H902-4			2	523.200	5.664	1.700

0.000	1.000 !				
SC3H50CH2-1		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C8H141-5,3-4		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H141-5,3		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H142-6		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H131-5,3-4,TA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,TA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,SA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,PA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H132-6,SA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H132-6,PA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C6H101-3,3		2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000 !C6H10				
C8H131-5,3-4,TA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,TA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,SA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,PA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H132-6,SA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H132-6,PA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C7H111-5,3,6P		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !C6H50H				
C7H111-5,1P		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !C6H50H				
C4H64,2-10H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C4H63,1-10H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C4H63,1-30H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C4H63,1-20H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C4H50H-13		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC3H6C0				
SQC4H70HP-4		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
CY(CCCO)COH		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
NC4KET210H		2	436.400	5.352	0.000

0.000	1.000	!IC4H700H				
C2H5CHOHCO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
CH3COCOHCH3			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C2H4COCH2OH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
CH3COHCO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H3O2H				
CH2COHCHO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H3O2H				
SQC4H70HP-402			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
PQC4H70HS-302			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
SQC4H70HS-402			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H702-1,300H			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
NC4KET130H-2			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
NC4KET240H-1			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
NC4KET240H-3			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
C4H60H00H1-4-3			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H2-2-1			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H1-3-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H1-2-3			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
HOCH2CHO			2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000	!CH3OCHO				
C4H71-400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H8O2-3				
C4H71-402			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C4H61-300H4			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C4H601-300H4			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H602CHO				
C4H602-100H4			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H602CHO				
HOCH2COCH2			2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000	!CH3COCH2O				
HOCH2CO			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO2				
HOCHCHO			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO2				
PC3H40H-3			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!C3H5O				
PC3H40H-1			2	411.000	4.820	0.000

0.000	1.000	!C3H50				
CH3COCHOH			2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000	!CH3COCH2O				
SC2H2OH			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO				
PC4H8OH-1			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H9O				
PC4H8OH-3			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H9O				
C4H7O1-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
PC4H8OH-4			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H9O				
SC4H8OH-2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H9O				
CH2COHCO			2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000	!HOC*CCJ*0				
C4H72-202			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C4H71-102			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C4H71-202			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C3H6OH1-1			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!NC3H7O				
PC4H8OH-202			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H8OH-102				
SC4H8OH-102			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H8OH-102				
C4H71-300CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H100OH1-202				
C4H72-100CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H100OH1-202				
C4H6			2	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H612			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H6-2			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H5-I			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H5-N			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H5-2			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H4			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H3-I			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H3-N			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H2			1	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H6O25			1	357.000	5.180	0.000

0.000	1.000 !				
C2H3CHOCH2		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
FURAN		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H6O23		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CHCHCHO		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
H2C4O		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H7CHO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
NC3H7CO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-1		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-2		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-3		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
SC3H5CHO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
SC3H5CO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C2H5COCH3		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
C2H5COCH2		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
CH2CH2COCH3		2	440.584	5.040	0.000
0.000	0.000 !				
CH3CHCOCH3		2	440.584	5.040	0.000
0.000	0.000 !				
C2H3COCH3		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
CH3CH00COCH3		2	546.562	5.698	0.000
0.000	0.000 !				
CH2CH00HCOCH3		2	546.562	5.698	0.000
0.000	0.000 !				
C2H5CHCO		2	436.950	5.016	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H6Q2-II		2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000 !				
C5H10-1		2	386.200	5.489	0.400
0.000	1.000 !				
C5H81-3		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C5H901-3		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
BC5H10		2	391.400	5.550	0.000
0.000	1.000 !				
CC5H9-A		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
CC5H9-B	!C5H91-3	2	396.800	5.458	0.000



0.000	1.000	!C5H91-3				
AC5H90-C			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!C5H91-3				
CC5H90-B			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!C5H91-3				
AC5H10			2	386.600	5.532	0.500
0.000	1.000	!				
AC5H9-A2			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!C5H91-3				
AC5H9-C			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!C5H91-3				
AC5H9-D			2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000	!C5H91-3				
B2E2M10J			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H901-3				
B13DE2M			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C5H81-3				
B13DE2MJ			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C5H7				
B12DE3M			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C5H81-3				
B2E3M10J			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H901-3				
TC4H8CHO			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
O2C4H8CHO			2	588.531	5.942	0.000
0.000	0.000	!				
O2HC4H8CO			2	588.531	5.942	0.000
0.000	0.000	!				
C6H101-5			2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000	!C6H10				
C6H9-A			2	346.876	5.564	0.000
0.000	1.000	!				
H15DE25DM			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!C6H500H				
H15DE25DM-S			2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000	!O2CH20CH202H				
H15DE25DM-A			2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000	!O2CH20CH202H				
H15DE25DM-A0			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H15DE25DM-S0			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H15DE2M-T			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!C6H50H				
IC4H7CHO			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
L-C6H4			2	412.300	5.349	0.000
0.000	1.000	!				
C-C6H4			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!				
C6H3			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C6H2			1	408.000	5.200	0.000

0.000	1.000 !				
C6H6		2	468.500	5.230	0.000
10.300	1.000 !				
FULVENE		2	468.500	5.230	0.000
0.000	1.000 !				
C6H5		2	412.300	5.349	0.000
0.000	1.000 !				
C6H500		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !				
C6H500H		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !				
C6H50H		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C6H50		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C6H40H		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !				
OC6H40H		2	621.100	5.640	0.000
0.000	1.000 !				
O-C6H402		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
P-C6H402		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
O-OC6H50J		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
P-OC6H50J		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
P-C6H302		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C5H6		1	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C5H5		1	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C5H6-L		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C#CCVCCJ		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C5H7		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
CVCCJCVVC		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
CVCCVCCJ		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
CVCCJCVCOH		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
HOCVCCVO		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
CVCCVCCOH		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
OC5H70		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
OC4H60		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
OC4H50		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000 !				
02CCH00J		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
H0CVCCJV0		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C5H50H		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C5H50		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C5H40H		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C5H40		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !				
C5H30		2	511.398	5.357	0.000
0.000	1.000 !				
CJVCCVCCV0		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
CVCCVCCJV0		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
CJVCCV0		2	443.200	4.120	0.000
0.000	1.000 !				
AR		0	136.500	3.330	0.000
0.000	0.000 !				
N2		1	97.530	3.621	0.000
1.760	4.000 !				
HE		0	10.200	2.576	0.000
0.000	0.000 !				
H2		1	38.000	2.920	0.000
0.790	280.000 !				
H		0	145.000	2.050	0.000
0.000	0.000 !				
O2		1	107.400	3.458	0.000
1.600	3.800 !				
O		0	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
H2O		2	572.400	2.605	1.844
0.000	4.000 !				
OH		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
OHV		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
H2O2		2	107.400	3.458	0.000
0.000	3.800 !				
H02		2	107.400	3.458	0.000
0.000	1.000 !				
CO		1	98.100	3.650	0.000
1.950	1.800 !				
CO2		1	244.000	3.763	0.000
2.650	2.100 !				
HOCO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
CH4		2	141.400	3.746	0.000
2.600	13.000 !				
CH3		1	144.000	3.800	0.000

0.000	0.000 !				
CH2		1	144.000	3.800	0.000
0.000	0.000 !				
CH2(S)		1	144.000	3.800	0.000
0.000	0.000 !				
C		0	71.400	3.298	0.000
0.000	0.000 !				
CH		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
CHV		1	80.000	2.750	0.000
0.000	0.000 !				
CH302H		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH302		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH202H		2	238.400	3.496	0.000
0.000	1.500 !				
CH30H		2	481.800	3.626	0.000
0.000	1.000 !				
CH30		2	417.000	3.690	1.700
0.000	2.000 !				
CH20H		2	417.000	3.690	1.700
0.000	2.000 !				
CH20		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
HCO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	0.000 !				
HCOH		2	498.000	3.590	0.000
0.000	1.000 !				
HO2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HOCH202H		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
HOCH202		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
OCH202H		2	481.800	3.626	1.700
0.000	1.000 !				
HOCH20		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
O2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HOCHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
OCHO		2	498.000	3.590	0.000
0.000	2.000 !				
C2H6		2	247.500	4.350	0.000
0.000	1.500 !				
C2H5		2	247.500	4.350	0.000
0.000	1.500 !				
C2H502H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H502		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H4		2	238.400	3.496	0.000

0.000	1.500 !				
C2H3		2	265.300	3.721	0.000
0.000	1.000 !				
CHOCHO		1	440.200	4.010	0.000
0.000	2.000 !				
C2H300H		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
C2H300		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !CH3CO2				
CHCHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !HCCOH				
C2H2		1	265.300	3.721	0.000
0.000	2.500 !				
C2H		1	265.300	3.721	0.000
0.000	2.500 !				
H2CC		2	209.000	4.100	0.000
0.000	2.500 !				
C2H50H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H50		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
PC2H40H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
SC2H40H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
O2C2H40H		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
C2H402H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H401-2		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
C2H301-2		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH2CHO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
O2CH2CHO		2	275.049	5.428	0.000
0.000	1.000 !				
H02CH2CO		2	279.007	5.505	1.300
0.000	1.000 !				
C2H30H		2	470.600	4.410	0.000
0.000	1.500 !				
C2H20H		2	224.700	4.162	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CO		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
HCCO		2	150.000	2.500	0.000
0.000	1.000 !				
HCCOH		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3CO3H		2	436.000	3.970	0.000

0.000	2.000 !				
CH3C03		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH3C02		2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000 !				
CH30CH3		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CH2		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CH202H		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CH202		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH20CH202H		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
02CH20CH202H		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
H02CH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
OCH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
HOCH20CO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CH20		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH30CO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
CH20CHO		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !				
C3H8		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H7		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H7		2	303.400	4.810	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H702H		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
NC3H702		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H702H		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H702		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
NC3H70		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
IC3H70		2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-2		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-3		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H2-1		2	435.200	4.662	2.700

0.000	1.000 !				
C3H600H1-202		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H1-302		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3H600H2-102		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C3KET12		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3KET13		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H51-2,300H		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
C3H52-1,300H		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
C3H501-200H-3		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !C3KET12				
C3H501-300H-2		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !C3KET12				
C3H601-2		2	403.600	4.968	2.000
0.000	1.000 !				
C3H601-3		2	403.600	4.968	2.000
0.000	1.000 !				
C3H6		2	307.800	4.140	0.000
0.000	1.000 !				
C3H5-A		2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000 !				
C3H5-S		2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000 !				
C3H5-T		2	316.000	4.220	0.000
0.000	1.000 !				
CC3H6		2	307.800	4.140	0.000
0.000	1.000 !C3H6				
C3H50		2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CHOCH2		2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000 !C3H50				
CH3CHCHO		2	387.860	4.687	0.000
0.000	0.000 !				
AC4H700H		2	330.435	5.741	0.000
0.000	1.000 !				
C3H60H1-2		2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
CH3CHCO		2	443.200	4.120	0.000
0.000	1.000 !				
AC3H500H		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
C3H60H2-1		2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
HOC3H602		2	487.900	4.820	0.000
0.000	1.000 !1109				
SC3H50H		2	304.276	5.450	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H50H		2	459.500	5.036	1.700

0.000	1.000 !				
C3H50H		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
CH2CCH20H		2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000 !				
C3H4-P		1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000 !				
C3H4-A		1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000 !				
C3H3		1	324.800	4.290	0.000
0.000	1.000 !				
CC3H4		1	252.000	4.760	0.000
0.000	1.000 !				
C3H2		2	209.000	4.100	0.000
0.000	1.000 !				
H2CCC(S)		2	265.300	3.721	0.000
0.000	1.000 !				
C3H2(S)		2	209.000	4.100	0.000
0.000	1.000 !				
C3H2C		1	290.616	4.368	0.000
0.000	1.000 !				
PC3H40H-2		2	300.783	5.377	0.000
0.000	1.000 !				
SC3H40H		2	298.893	5.345	0.000
0.000	1.000 !				
C3H30		2	301.263	5.055	0.000
0.000	1.000 !				
C3H302H		2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000 !				
C2HCHO		2	343.033	4.884	0.000
0.000	1.000 !				
C2H5CHO		2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000 !				
C2H5CO		2	424.600	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CH2CHO		2	424.600	4.820	0.000
0.000	1.000 !				
C2H3CHO		2	428.800	4.958	2.900
0.000	1.000 !				
C2H3CO		2	443.200	4.120	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH3		2	435.500	4.860	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH2		2	435.500	4.860	0.000
0.000	1.000 !				
CH3COCH2O2		2	502.115	5.429	0.000
0.000	0.000 !				
CH3COCH2O		2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000 !				
C3KET21		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C4H10		2	350.900	5.206	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H9		2	352.000	5.240	0.000



0.000	1.000 !				
SC4H9		2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H90		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H90		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H902		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H902		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H902H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
SC4H902H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-2		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-1		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-2		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H801-4		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H802-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-202		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-302		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H1-402		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-102		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-302		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H800H2-402		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C4H71-2,400H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H72-1,300H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H72-1,400H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H800H1-202				
C4H71-2,300H		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!C4H800H1-202				
C4H701-300H-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H701-300H-2			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H701-200H-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H701-400H-2			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H701-200H-3			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H702-300H-1			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H72-100H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H802-3				
NC4KET12			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET13			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET14			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET21			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET23			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
NC4KET24			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
C4H71-300H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H802-3				
C4H71-3,400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
C4H72-3,400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H02CH2CHO			2	275.049	5.428	0.000
0.000	1.000	!O2CH2CHO				
IC4H10			2	335.700	5.208	0.100
0.000	1.000	!				
IC4H9			2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000	!				
TC4H9			2	352.000	5.240	0.000
0.000	1.000	!				
TC4H90			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
IC4H90			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
IC4H80			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H7CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H7CO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
IC3H6CHO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!				
TC3H6CHO			2	436.400	5.352	0.000

0.000	1.000 !				
IC3H5CHO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H602CHO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H502HCHO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H602HCO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
TC3H60CHO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H6CO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H5CO		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC3H4CHO-A		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC3H5CO				
SC4H70H-I		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
IC4H902		2	502.252	5.430	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H902		2	502.252	5.430	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H802H-I		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
IC4H802H-T		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
TC4H802H-I		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
CC4H80		2	444.197	5.063	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H800H-I02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H800H-T02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H800H-I02		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4KETII		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
IC4KETIT		2	549.655	5.716	0.000
0.000	0.000 !				
TIC4H7Q2-I		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IIC4H7Q2-I		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IIC4H7Q2-T		2	600.078	6.009	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H700H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H902H		2	505.540	5.450	0.000
0.000	0.000 !				
TC4H902H		2	505.540	5.450	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H8		2	344.500	5.089	0.500

0.000	1.000 !				
IC4H7		2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H7-I1		2	380.022	4.633	0.000
0.000	0.000 !				
IC4H702		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
IC4H600H-I		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
CCYCC00C-T1		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
C2CYC00C-I1		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
IC4H70		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
CVCYCCOC		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC3H6C0				
CCYC20C0		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
CCYCC00C-I2		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
CH0IC3H60		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
IC3H500CH2		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !TC3H60CH0				
CCYCC0-T1		2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000 !C3H50				
IC4H80H-IT		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !PC4H90				
IC4H80H-TI		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !PC4H90				
IC4H70H		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
IC4H80H		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
IC4H60H		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !				
TQJC4H80H		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
TQC4H80I		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
QC4H70HP		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
TQC4H70HI		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
CCY(CCO)COH		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
C2CY(COC)OH		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
IQJC4H80H		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
IC3H60HCH0		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
IQC4H80T		2	502.200	5.356	1.800

0.000	1.000	!C4H80H-102				
IQC4H70HT			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
CCY(CCOC)OH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
CH2COHCH200H			2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000	!C3KET12				
TC3H60H			2	459.500	5.036	1.700
0.000	1.000	!				
TQC4H70HI02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HT02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HIQ-I			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
TQC4H70HIQ-P			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IC3H5COHQ			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
CH2CQC0HQ			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
IC3H5Q			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!AC3H500H				
COHQCYC(COC)			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
QCYC(CCOC)OH			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
HOCOCQ(CH3)2			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
IQC4H70HT02			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IQC4H80TQ-I			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IQC4H70HTQ-P			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
CHOC(CH3)OHCH2Q			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
CO(CH200H)2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
CH3COCHO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H302H				
IC3H50CH2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H70				
IC4H700CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
IC4H700IC4H7			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H8-1			2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000	!				
C4H8-2			2	355.000	4.650	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-1			2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H71-2			2	357.100	4.720	0.000

0.000	1.000 !				
C4H71-3		2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000 !				
C4H71-4		2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000 !				
C4H72-2		2	357.100	4.720	0.000
0.000	1.000 !				
C4H71-0		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
PC4H80H-2		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !PC4H90				
SC4H80H-1		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !PC4H90				
SC4H80H-3		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !PC4H90				
C4H71-30H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
C4H71-40H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
C4H71-10H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
C4H71-20H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
C4H72-10H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
C4H72-20H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H80				
SQC4H80P		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
PQC4H80S		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
PQC4H70HS-3		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
NC4KET120H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
SQC4H70HS-4		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
SQC4H80S		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
NC4KET230H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
SC4H80H-302		2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000 !C4H80H-102				
CCY(COCC)0H		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
C4H702-1		2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000 !IC4H700H				
C4H6-1		2	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000 !C4H6				
AC3H50CH2		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !SC3H50CH2				
C5H10-2		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
CC5H10		2	437.102	5.017	0.000

0.000	0.000 !				
C6H10D24		2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000 !C6H10				
C5H91-3		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
C5H92-4		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
C5H92-5		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
C5H91-4		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
C5H91-5		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !				
C5H902-4		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
SC3H50CH2-1		2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C4H70				
C8H141-5,3-4		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H141-5,3		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H142-6		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
C8H131-5,3-4,TA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,TA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,SA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H131-5,3,PA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H132-6,SA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C8H132-6,PA		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !02CH20CH202H				
C6H101-3,3		2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000 !C6H10				
C8H131-5,3-4,TA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,TA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,SA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H131-5,3,PA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H132-6,SA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C8H132-6,PA0		2	581.300	6.506	2.000
0.000	1.000 !NC7KET12				
C7H111-5,3,6P		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !C6H50H				
C7H111-5,1P		2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000 !C6H50H				
C4H64,2-10H		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!C4H70				
C4H63,1-10H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H70				
C4H63,1-30H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H70				
C4H63,1-20H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H70				
C4H50H-13			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC3H6CO				
SQC4H70HP-4			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
CY(CCCO)COH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
NC4KET210H			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!IC4H700H				
C2H5CHOHCO			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
CH3COCOCH3			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C2H4COCH2OH			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
CH3COHCO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H302H				
CH2COHCHO			2	301.658	5.310	0.000
0.000	1.000	!C3H302H				
SQC4H70HP-402			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
PQC4H70HS-302			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
SQC4H70HS-402			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H702-1,300H			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
NC4KET130H-2			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
NC4KET240H-1			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
NC4KET240H-3			2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000	!IC4H6Q2-II				
C4H60H00H1-4-3			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H2-2-1			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H1-3-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
C4H60H00H1-2-3			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!NC4KET12				
HOCH2CHO			2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000	!CH3OCHO				
C4H71-400H			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H802-3				
C4H71-402			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CHO				
C4H61-300H4			2	436.400	5.352	0.000



0.000	1.000	!TC3H60CH0				
C4H601-300H4			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H602CH0				
C4H602-100H4			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H602CH0				
HOCH2COCH2			2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000	!CH3COCH20				
HOCH2CO			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO2				
HOCHCHO			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO2				
PC3H40H-3			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!C3H50				
PC3H40H-1			2	411.000	4.820	0.000
0.000	1.000	!C3H50				
CH3COCHOH			2	447.639	5.086	0.000
0.000	0.000	!CH3COCH20				
SC2H20H			2	436.000	3.970	0.000
0.000	2.000	!CH3CO				
PC4H80H-1			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
PC4H80H-3			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
C4H701-4			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
PC4H80H-4			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
SC4H80H-2			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!PC4H90				
CH2COHCO			2	435.200	4.662	2.700
0.000	1.000	!HOC*CCJ*0				
C4H72-202			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
C4H71-102			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
C4H71-202			2	436.400	5.352	0.000
0.000	1.000	!TC3H60CH0				
C3H60H1-1			2	481.500	4.997	1.700
0.000	1.000	!NC3H70				
PC4H80H-202			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
SC4H80H-102			2	502.200	5.356	1.800
0.000	1.000	!C4H80H-102				
C4H71-300CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H72-100CH3			2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000	!C5H1000H1-202				
C4H6			2	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000	!				
C4H612			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H6-2			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C4H5-I			2	357.000	5.180	0.000

0.000	1.000 !				
C4H5-N		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H5-2		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H4		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H3-I		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H3-N		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H2		1	357.000	4.720	0.000
0.000	1.000 !				
C4H6O25		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C2H3CHOCH2		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H4O		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
C4H6O23		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
CH2CHCHCHO		1	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
H2C4O		2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000 !				
NC3H7CHO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
NC3H7CO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-1		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-2		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C3H6CHO-3		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
SC3H5CHO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
SC3H5CO		2	464.200	5.009	2.600
0.000	1.000 !				
C2H5COCH3		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
C2H5COCH2		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
CH2CH2COCH3		2	440.584	5.040	0.000
0.000	0.000 !				
CH3CHCOCH3		2	440.584	5.040	0.000
0.000	0.000 !				
C2H3COCH3		2	454.000	5.413	3.300
0.000	1.000 !				
CH3CH00COCH3		2	546.562	5.698	0.000
0.000	0.000 !				
CH2CH00HCOCH3		2	546.562	5.698	0.000
0.000	0.000 !				
C2H5CHCO		2	436.950	5.016	0.000

0.000	0.000 !				
IC4H6Q2-II		2	597.176	5.992	0.000
0.000	0.000 !				
C5H10-1		2	386.200	5.489	0.400
0.000	1.000 !				
C5H81-3		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !				
C5H901-3		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !				
BC5H10		2	391.400	5.550	0.000
0.000	1.000 !				
CC5H9-A		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
CC5H9-B		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
AC5H90-C		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
CC5H90-B		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
AC5H10		2	386.600	5.532	0.500
0.000	1.000 !				
AC5H9-A2		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
AC5H9-C		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
AC5H9-D		2	396.800	5.458	0.000
0.000	1.000 !C5H91-3				
B2E2M10J		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !C5H901-3				
B13DE2M		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C5H81-3				
B13DE2MJ		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C5H7				
B12DE3M		2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000 !C5H81-3				
B2E3M10J		2	523.200	5.664	1.700
0.000	1.000 !C5H901-3				
TC4H8CHO		2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000 !				
O2C4H8CHO		2	588.531	5.942	0.000
0.000	0.000 !				
O2HC4H8CO		2	588.531	5.942	0.000
0.000	0.000 !				
C6H101-5		2	337.788	5.608	0.000
0.000	1.000 !C6H10				
C6H9-A		2	346.876	5.564	0.000
0.000	1.000 !				
H15DE25DM		2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000 !C6H500H				
H15DE25DM-S		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !O2CH20CH202H				
H15DE25DM-A		2	395.000	4.037	1.300
0.000	1.000 !O2CH20CH202H				
H15DE25DM-AO		2	496.000	5.200	0.000

0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H15DE25DM-S0			2	496.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!C4H800H1-202				
H15DE2M-T			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!C6H50H				
IC4H7CHO			2	476.000	5.778	2.600
0.000	1.000	!				
L-C6H4			2	412.300	5.349	0.000
0.000	1.000	!				
C-C6H4			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!				
C6H3			2	357.000	5.180	0.000
0.000	1.000	!				
C6H2			1	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
C6H6			2	468.500	5.230	0.000
10.300	1.000	!				
FULVENE			2	468.500	5.230	0.000
0.000	1.000	!				
C6H5			2	412.300	5.349	0.000
0.000	1.000	!				
C6H500			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!				
C6H500H			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!				
C6H50H			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
C6H50			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
C6H40H			2	464.800	5.290	0.000
10.320	0.000	!				
OC6H40H			2	621.100	5.640	0.000
0.000	1.000	!				
O-C6H402			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
P-C6H402			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
O-OC6H50J			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
P-OC6H50J			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
P-C6H302			2	450.000	5.500	0.000
0.000	1.000	!				
C5H6			1	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
C5H5			1	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
C5H6-L			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
C#CCVCCJ			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
C5H7			2	408.000	5.200	0.000
0.000	1.000	!				
CVCCJCVC			2	408.000	5.200	0.000

0.000	1.000 !					
CVCCVCCJ		2	408.000	5.200	0.000	
0.000	1.000 !					
CVCCJCVCOH		2	523.200	5.664	1.700	
0.000	1.000 !					
HOCVCCVO		2	435.200	4.662	2.700	
0.000	1.000 !					
CVCCVCCOH		2	523.200	5.664	1.700	
0.000	1.000 !					
OC5H70		2	496.000	5.200	0.000	
0.000	1.000 !					
OC4H60		2	496.000	5.200	0.000	
0.000	1.000 !					
OC4H50		2	496.000	5.200	0.000	
0.000	1.000 !					
O2CCH00J		2	470.600	4.410	0.000	
0.000	1.500 !					
HOCVCCJVO		2	435.200	4.662	2.700	
0.000	1.000 !					
C5H50H		2	450.000	5.500	0.000	
0.000	1.000 !					
C5H50		2	450.000	5.500	0.000	
0.000	1.000 !					
C5H40H		2	450.000	5.500	0.000	
0.000	1.000 !					
C5H40		2	450.000	5.500	0.000	
0.000	1.000 !					
C5H30		2	511.398	5.357	0.000	
0.000	1.000 !					
CJVCCVCCVO		2	523.200	5.664	1.700	
0.000	1.000 !					
CVCCVCCJVO		2	523.200	5.664	1.700	
0.000	1.000 !					
CJVCCVO		2	443.200	4.120	0.000	
0.000	1.000 !					
B1M2	!C2H3CO	2	408.000	5.200	0.000	
0.000	1.000					
B2M2		2	408.000	5.200	0.000	
0.000	1.000					
B1M3		2	408.000	5.200	0.000	
0.000	1.000					
RIBALDG		2	329.641	5.574	0.000	
0.000	1.000					
RIBALDB		2	303.408	5.750	0.000	
0.000	1.000					
RIBALDG00		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
RIBALDB00		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
QIBALDG2		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
QIBALDG3		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
QIBALDB3		2	285.971	6.560	0.000	0.000

1.000						
ZIBALDG2		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
ZIBALDG3		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
ZIBALDB3		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
KIA4G2		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
KIA4G3		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
ETIBALDGB		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
ETIBALDGG		2	285.971	6.560	0.000	0.000
1.000						
RALD4X			2	329.641	5.574	0.000
0.000	1.000					
RALD400X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
QA4X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
ZA4X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
ETALD4X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
KEA4X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
RALD5X00			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
QA5X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
ZA5X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					
KEA5X			2	285.971	6.560	0.000
0.000	1.000					

RALD3BG		2	411.000	4.820	0.000	0.000	1.000
CH3CH00CHOL			2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000							
CH200HCH00CHOL			2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000							
CH200CH00HCHOL			2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000							
CH2CH00HCHOL			2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000							
KEA3B3L			2	411.000	4.820	0.000	0.000
1.000							
ETC3H402			2	411.000	4.820	0.000	0.000
1.000							

DIALLYL	2	426.300	5.510	0.000	0.000	1.000
RC6H9A	2	426.300	5.510	0.000	0.000	1.000
RYC6H9	2	426.300	5.510	0.000	0.000	1.000
LC5H8	2	408.000	5.200	0.000	0.000	1.000
CH3C6H4	2	495.300	5.680	0.000	0.000	1.000
O2C2H4O2H	2	470.600	4.410	0.000	0.000	1.500
CH2OHCHO	2	496.000	5.200	0.000	0.000	1.000
DIMEPTD	2	457.800	6.173	0.300	0.000	1.000
! Copy from cpes						
AC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000	
0.000						
CH3CO2H	2	436.000	3.970	0.000	0.000	
2.000						
CH2COH2	2	436.000	3.970	0.000	0.000	
2.000						
CH3COCH3	2	411.000	4.820	0.000	0.000	
1.000						
C2H3CHO	2	443.200	4.120	0.000	0.000	
1.000						
C2H5CHO	2	411.000	4.820	0.000	0.000	
1.000						
C4H9CHO	2	500.000	5.640	0.000	0.000	
1.000						
CH2CHCH2	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
1.000						
CHCHCH3	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
1.000						
CH2CCH3	2	316.000	4.220	0.000	0.000	
1.000						
AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	
0.000						
C6H5CH2OH	2	622.400	5.530	0.000	0.000	
1.000						
C6H4O2	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
1.000						
C6H6	2	468.500	5.230	0.000	10.30	
1.000						
C6H5CHO	2	622.400	5.530	0.000	0.000	
1.000						
C6H5C2H4C6H5	2	783.800	6.640	0.000	0.000	
1.000						
NC4H8	2	355.000	4.650	0.000	0.000	
1.000						
C4H6	2	357.000	5.180	0.000	0.000	
1.000						
C	0	71.400	3.298	0.000	0.000	
0.000						
C12H8	2	689.800	6.500	0.000	0.000	
1.000						
C12H9	2	676.5	6.31	0.00	20.00	
1.000	!					
C2H	1	209.000	4.100	0.000	0.000	
2.500						
C2H2	1	209.000	4.100	0.000	0.000	

2.500					
C2H4	2	280.800	3.971	0.000	0.000
1.500					
C2H5	2	252.300	4.302	0.000	0.000
1.500					
C2H6	2	252.300	4.302	0.000	0.000
1.500					
C3H2	2	209.000	4.100	0.000	0.000
1.000					
C3H3	2	252.000	4.760	0.000	0.000
1.000					
C3H6	2	307.800	4.140	0.000	0.000
1.000					
C3H8	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
NC3H7O	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
C3H7OOH	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
C4H2	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C4H3	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C4H4	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C4H5	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
CH2C3H5	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1.000					
SC4H7	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1.000					
C4H9OOH	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
CYC5H4O	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
C5H7	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5H11OOH	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
C6H5	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C6H5O	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
LC6H6	2	412.300	5.349	0.000	0.000
1.000					
C6H10-ONE	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C7H7	2	495.300	5.680	0.000	0.000
1.000					
NC7H15OOH	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
CYC5H7	1	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
CYC5H8	1	408.000	5.200	0.000	0.000



1.000					
CYC6H8	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6H12	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6H10	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CH	1	80.000	2.750	0.000	0.000
0.000					
CH2	1	144.000	3.800	0.000	0.000
0.000					
CH2C0	2	436.000	3.970	0.000	0.000
2.000					
CH20	2	498.000	3.590	0.000	0.000
2.000					
CH20H	2	417.000	3.690	1.700	0.000
2.000					
CH2S	1	144.000	3.800	0.000	0.000
0.000					
CH3	1	144.000	3.800	0.000	0.000
0.000					
CH3C0	2	436.000	3.970	0.000	0.000
2.000					
CH30	2	417.000	3.690	1.700	0.000
2.000					
CH30H	2	481.800	3.626	0.000	0.000
1.000					
CH4	2	141.400	3.746	0.000	2.600
13.000					
C0	1	98.100	3.650	0.000	1.950
1.800					
C02	1	244.000	3.763	0.000	2.650
2.100					
CYC5H6	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
MCPTD	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
CRESOL	2	621.100	5.640	0.000	0.000
1.000					
CSOLID	2	2302.	12.91	0.00	45.00
1.000					
NC10H20	2	540.980	7.150	0.000	0.000
1.000					
C6H5CH2C6H5	2	712.6	6.890	0.000	0.000
1.000					
DIPE	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1.000					
MTBE-0	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
CH30CH3	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
CH3CH3-C5H6	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
C6H5C2H5	2	523.600	5.960	0.000	0.000

1.000					
NC7H14	2	459.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
NC6H12	2	412.300	5.349	0.000	0.000
1.000					
C5H9CHO	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
ETBE	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1.000					
NEOC5H10-0	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
C4H80	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5H10-0	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC7H140	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
IC8H160	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
C2H50H	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
C2H500	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
C2H500H	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
C2H40	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
C6H5C2H	2	534.300	5.710	0.770	0.000
1.000					
BIPHENYL	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1.000					
C14H10	2	772.0	6.960	0.000	38.80
1.000					
C6H50H	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
FLUORENE	2	712.6	6.890	0.000	0.000
1.000					
C10H8	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
CH20HCH20H	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
H	0	145.000	2.050	0.000	0.000
0.000					
H2	1	38.000	2.920	0.000	0.790
280.000					
H20	2	572.400	2.605	1.844	0.000
4.000					
H202	2	107.400	3.458	0.000	0.000
3.800					
HCC0	2	150.000	2.500	0.000	0.000
1.000					
HCO	2	498.000	3.590	0.000	0.000
0.000					
HC03	2	498.000	3.590	0.000	0.000

0.000					
HE	0	10.200	2.576	0.000	0.000
0.000					
H02	2	107.400	3.458	0.000	0.000
1.000					
IC4H8	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1.000					
IC3H7CHO	2	455.000	4.650	0.000	0.000
1.000					
IC4H9P	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
IC4H9P-00	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
IC4H9T	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
IC4H9T-00	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
IC4H10	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
IC16H34	2	650.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC4H7	2	355.000	4.650	0.000	0.000
1.000					
IC8H18	2	494.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
INDENE	2	588.6	5.960	0.650	0.000
1.000					
IC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
IC3H70H	2	468.300	4.760	0.000	0.000
1.000					
IC3H700	2	468.300	4.760	0.000	0.000
1.000					
IC3-Q00H	2	468.300	4.760	0.000	0.000
1.000					
IC3-00Q00H	2	468.300	4.760	0.000	0.000
1.000					
IC5H10	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NEOC5-0Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
IC4-0Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C3-0Q00H	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
NC4-0Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5-0Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC7-0Q00H	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
C7DIONE	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
C7KETONE	2	559.980	6.310	0.000	0.000

1.000					
IC8-0Q00H	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
DME-0Q00H	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
NC10-0Q00H	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1.000					
NC12-0Q00H	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1.000					
IC16-0Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
MCYC6-0Q00H	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
MTBE-0Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
IC3H5CHO	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
MCYC6	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
CH3CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000
2.000					
CH3C03	2	436.000	3.970	0.000	0.000
2.000					
C10H7CH3	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1.000					
CH300	2	417.000	3.690	1.700	0.000
2.000					
CH300H	2	481.800	3.626	0.000	0.000
1.000					
MTBE	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
N2	1	97.530	3.621	0.000	1.760
4.000					
C10H7OH	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
C10H7CHO	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
CH3C10H60H	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
CH3C10H60	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
NC4H9P	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
NC4H9S	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
NC4H10	2	352.000	5.240	0.000	0.000
1.000					
NC10H22	2	540.980	7.150	0.000	0.000
1.000					
NC12H26	2	580.000	7.600	0.000	0.000
1.000					
NC5H12	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC7H16	2	459.980	6.310	0.000	0.000

1.000					
NEOC5H12	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC3H7	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
NC3H700	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
NC3-Q00H	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
NC3-00Q00H	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
0	0	80.000	2.750	0.000	0.000
0.000					
02	1	107.400	3.458	0.000	1.600
3.800					
0H	1	80.000	2.750	0.000	0.000
0.000					
IC8H16	2	494.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
NC5H10	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
PC3H4	1	252.000	4.760	0.000	0.000
1.000					
CH3C03H	2	443.200	4.120	0.000	0.000
1.000					
HC03H	2	443.200	4.120	0.000	0.000
1.000					
C3H60	2	411.000	4.820	0.000	0.000
1.000					
C5H8	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C16H10	2	834.9	7.240	0.000	45.00
1.000					
NC10-Q00H	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1.000					
NC12-Q00H	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1.000					
C2-Q00H	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1.500					
C2-00Q00H	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1.500					
C2-0Q00H	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1.500					
NC4-Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5-Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC7-Q00H	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
DME-Q00H	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
IC16-Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC16T-Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000

1.000						
IC8-Q00H	2	594.000	6.170	0.000	0.000	
1.000						
IC4P-Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1.000						
IC4T-Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1.000						
MCYC6-Q00H	2	595.300	5.680	0.430	12.30	
1.000						
MTBE-Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1.000						
NEOC5-Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1.000						
IC8T-Q00H	2	594.000	6.170	0.000	0.000	
1.000						
MCYC6T-Q00H	2	595.300	5.680	0.430	12.30	
1.000						
NC10H21	2	540.980	7.150	0.000	0.000	
1.000						
NC10H21-00	2	640.980	7.150	0.000	0.000	
1.000						
NC12H25	2	580.000	7.600	0.000	0.000	
1.000						
NC12H25-00	2	680.000	7.600	0.000	0.000	
1.000						
C2H40H	2	362.600	4.530	0.000	0.000	
1.500						
CH2CHO	2	436.000	3.970	0.000	0.000	
2.000						
CH3CHOH	2	362.600	4.530	0.000	0.000	
1.500						
NC4H9-00	2	496.000	5.200	0.000	0.000	
1.000						
NC5H9	2	408.000	5.200	0.000	0.000	
1.000						
NC5H11	2	392.000	5.640	0.000	0.000	
1.000						
NC5H1200	2	492.000	5.640	0.000	0.000	
1.000						
NC7H15	2	459.980	6.310	0.000	0.000	
1.000						
NC7H15-00	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1.000						
C12H7	2	693.1	6.47	0.00	18.00	
1.000						
CH3COCH2	2	424.600	4.820	0.000	0.000	
1.000						
C2H4CHO	2	424.600	4.820	0.000	0.000	
1.000						
CYC6-00	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1.000						
CYC6H11	2	468.500	5.230	0.000	10.30	
1.000						
CYC5H5	2	408.000	5.200	0.000	0.000	

1.000					
RDIPe	2	432.000	6.000	0.000	0.000
1.000					
CH30CH2	2	303.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
DME-00	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
C6H4C2H	2	535.6	5.72	0.77	12.00
1.000					
RBIPHENYL	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1.000					
C14H9	2	772.0	6.96	0.00	38.80
1.000					
C10H7	2	630.4	6.18	0.00	16.50
1.000					
IC16H33-00	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC16H33	2	650.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC8H17	2	494.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
IC8H17-00	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
INDENYL	2	588.6	5.960	0.000	0.000
1.000					
RMCYC6-00	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
RMCYC6	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
C10H7CH2	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1.000					
C10H6CH3	2	660.0	6.350	0.000	0.000
1.000					
C6H4CH3	2	495.300	5.680	0.000	0.000
1.000					
RMTBE	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
MTBE-00	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
C10H70	2	630.400	6.180	0.000	0.000
1.000					
NEOC5H11	2	392.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NEOC5H11-00	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
C16H9	2	834.9	7.24	0.00	45.00
1.000					
C6H5C2H2	2	546.200	6.000	0.000	0.000
1.000					
RXYLENE	2	523.600	5.960	0.000	0.000
1.000					
C6H5C2H3	2	546.200	6.000	0.130	15.00
1.000					
TAME	2	432.000	6.000	0.000	0.000

1.000					
TETRALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
DECALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
RDECALIN	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
C7H8	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
C2H3	2	209.000	4.100	0.000	0.000
1.000					
XYLENE	2	523.600	5.960	0.000	0.000
1.000					
NC10-00Q00H	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1.000					
NC12-00Q00H	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1.000					
NC4-00Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5-00Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC7-00Q00H	2	559.980	6.310	0.000	0.000
1.000					
DME-00Q00H	2	403.400	4.810	0.000	0.000
1.000					
IC16-00Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC16T-00Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
IC8-00Q00H	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1.000					
IC4P-00Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
IC4T-00Q00H	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
MCYC6-00Q00H	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
MTBE-00Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NEOC5-00Q00H	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
MCYC6T-00Q00H	2	595.300	5.680	0.430	12.30
1.000					
NC16H34	2	650.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
NC16H33	2	650.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
NC16H33-00	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
NC16-Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
NC16-00Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000					
NC16-0Q00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000



1.000

BIN1A	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN1AJ	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN1B	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN1BJ	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN1C	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN1CJ	2	951.685	8.471	0.000	0.000	1.000
BIN2A	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN2AJ	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN2B	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN2BJ	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN2C	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN2CJ	2	1371.03	10.65	0.000	0.000	1.000
BIN3A	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN3AJ	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN3B	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN3BJ	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN3C	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN3CJ	2	1964.07	13.41	0.000	0.000	1.000
BIN4A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN4AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN4B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN4BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN4C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN4CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN5CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN6CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN7CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN8CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN9A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN9AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN9B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN9BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN9C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000

BIN9CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10C	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN10CJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN11A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN11AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN11B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN11BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN12A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN12AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN12B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN12BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN13A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN13AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN13B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN13BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN14A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN14AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN14B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN14BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN15A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN15AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN15B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN15BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN16A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN16AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN16B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN16BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN17A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN17AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN17B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN17BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN18A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN18AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN18B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN18BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN19A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN19AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN19B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN19BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN20A	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN20AJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN20B	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
BIN20BJ	2	2802.76	16.88	0.000	0.000	1.000
CYC6-Q00H-2	2	568.500	5.230	0.000	10.30	1.000
CYC6-Q00H-3	2	568.500	5.230	0.000	10.30	1.000
CYC6-Q00H-4	2	568.500	5.230	0.000	10.30	1.000
CYC6-00Q00H-2	2	568.500	5.230	0.000	10.30	1.000

1.000					
CYC6-00Q00H-3	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6-00Q00H-4	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6-0Q00H-2	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6-0Q00H-3	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6-0Q00H-4	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6H10-0-12	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6H10-0-13	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
CYC6H10-0-14	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C3H500H	2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-34	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-35	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-43	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-45	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-53	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-0Q00H-54	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5H80	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5H9-3	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5H9-4	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
NC5H9-5	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C3H500	2	407.800	4.140	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00-3	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00-4	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00-5	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H-34	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H-35	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H-43	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H-45	2	508.000	5.200	0.000	0.000

1.000					
C5EN-Q00H-53	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H-54	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-34	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-35	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-43	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-45	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-53	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-00Q00H-54	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5H10-OH	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
C5H10-OH00	2	492.000	5.640	0.000	0.000
1.000					
NC3H7OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1.0					
N1C4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
N2C4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2CHOHCH2	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2CHOCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2COHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CHCHOHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH2CH2CHOHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
MEK	2	454.0000000	5.413000000	3.30	0.00
1.0					
TC4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
IC4H9OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2CH2CH2O	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
C3H7CHO	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2CHOH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1.0					
CH3CHCH2OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1.0					
CH2CH2CH2OH	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74
1.0					
CH3CH2CH2O	2	482.146548	5.008549665	1.66	6.74

1.0					
CH3COHCH3	2	468.300000	4.760000000	0.00	0.00
1.00					
CH2CHOHCH3	2	468.300000	4.760	0.00	0.00
1.000					
CH3CH2CH2CHOH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CH2CHCH2OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CHCH2CH2OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH2CH2CH2CH2OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
RTC4H8OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
RTC4H9O	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CHCH2OCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CHCH3CHOH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH3CCH2OHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
CH2CHCH2OHCH3	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
1.0					
C4H7OH	2	503.0722524	5.339941638	1.67	8.88
8.88	1.0				
C3H5OH	2	411.000	4.820	0.00	0.00
1.0					
RCRESOLO	2	621.100	5.640	0.00	0.00
1.0					
RCRESOLC	2	621.100	5.640	0.00	0.00
1.0					
C10H10	2	630.400	6.180	0.00	16.50
1.0					
BZFUR	2	630.400	6.180	0.00	16.50
1.0					
ODECAL	2	630.400	6.180	0.00	16.50
1.0					
RTETRALIN	2	630.400	6.180	0.00	16.50
1.0					
RTETRA00	2	630.400	6.180	0.00	16.50
1.0					
TMBENZ	2	523.600	5.960	0.00	0.000
1.0					
NPBENZ	2	495.300	5.680	0.430	12.30
1.0					
RC9H11	2	523.600	5.960	0.00	0.000
1.0					
C6H5OCH3	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
MB	2	468.000	5.850	0.000	0.000
0.000 !Revised					
RMBX	2	468.500	5.230	0.000	0.000

1.000					
MCR0T	2	468.500	5.230	0.000	0.000
1.000					
MACRIL	2	430.100	5.833	0.000	0.000
1.000					
RMP3	2	430.100	5.833	0.000	0.000
1.000					
CH30CO	2	395.000	4.037	1.300	0.000
1.000					
ETMB583	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
KEHYMB	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
DIBZFUL	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1.000					
DIFENET	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1.000					
RMB00X	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
QMB00X	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
ZMB00X	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
KHDECA	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
QDECOOH	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
RDECOO	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
ZDECA	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000					
RMCR0TA	2	468.500	5.230	0.000	0.000
1.000	!RG taken from MCR0T				
MD	2	604.4	7.305	1.7	0.0
1.000	!RG taken from Herbi				
RMDX	2	604.4	7.305	1.7	0.0
1.000	!RG taken from Herbi				
CH30CHO	2	395.000	4.037	1.300	0.000
1.000	!RG taken from CH30C				
ETEROMD	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1.000	!RG taken from KHY12				
MDKETO	2	680.000	7.600	0.000	0.000
1.000	!RG taken from KHY12				
C7H15COCHO	2	594.000	6.170	0.000	0.000
1.000	!RG taken from KEHY8				
RMD00X	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!RG taken from Q160X				
QMD00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!RG taken from Q160X				
ZMD00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!RG taken from Q160X				
UME10	2	604.4	7.305	2.0	0.0
1.000	!RG md2d taken fr				
UME7	2	556.82	6.41		1.70

16.14	1.000		!RG ms6d taken fro			
C12H22		2	580.000	7.600	0.000	0.000
1.000	!AF NC12					
DCYC5		2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000	!AF DECALIN					
UME16		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
ETEROMPA		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
MPA		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
KHMLIN1		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
MLIN1		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
MLINO		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
MEOLE		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
MSTEA		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RUME7		2	556.82	6.41		1.70
16.14	1.000		!RG ms6d taken from S			
RME7		2	556.82	6.41		1.70
16.14	1.000		!RG ms6d taken from S			
RUME10		2	604.4	7.305	2.0	0.0
1.000	!RG md2d taken fr					
RMPAX		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
QMPA00H		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMPA00X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
ZMPA00H		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLIN1A		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLIN1X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLIN100X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
QMLIN100X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
ZMLIN100X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLINA		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLINX		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
RMLIN00X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
QMLIN00X		2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000	!R160X					
ZMLIN00X		2	750.000	8.350	0.000	0.000

1.000	!R160X					
RMEOLEA	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMEOLES	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMEOLE00X	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
QMEOLE00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
ZMEOLE00X	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RSTEAX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMSTEAX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
QMSTEAX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
ZMSTEAX	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
U2ME12	2	620.000	8.000	0.000	0.000	
1.000	!NC14					
ALDEST	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1.000						
RALDEST	2	568.500	5.230	0.000	10.30	
1.000						
C12H18	2	620.000	8.000	0.000	0.000	
1.000						
RODECA	2	630.400	6.180	0.000	16.50	
1.000						
ALDINS	2	620.000	8.000	0.000	0.000	
1.000						
RUME16	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
NC10H19	2	540.980	7.150	0.000	0.000	
1.000	!R10MX					
C8H9	2	546.200	6.000	0.000	0.000	
1.000	!RSTYR					
NC7H1302	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1.000	!Q700X					
NC7H1300H	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1.000	!Q700X					
NC7H13	2	559.980	6.310	0.000	0.000	
1.000	!R700X					
LC6H5	2	412.300	5.349	0.000	0.000	
1.000	!MIT !LC6H6					
C6H2	1	357.000	5.180	0.000	0.000	
1.000	!MIT					
C8H2	1	495.3	5.68	0.43	12.30	
1.000	!PITSCH					
C6H3	1	357.000	5.180	0.000	0.000	
1.000	!MIT					
C6H4	2	412.300	5.349	0.000	0.000	
1.000	!MIT					
BENZYNE	2	468.500	5.230	0.000	10.30	



1.000 !c6h6					
NC20M00H	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1.000 !Q100X					
MSTEAKETO	2	750.000	8.350	0.000	0.000
1.000 !KHMLIN1					
C5H50	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000					
C2H202	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1.500					
C2H402	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
GLIET	2	470.600	4.410	0.000	0.000
1.500					
CH0CH2CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000
1.000					
C3H403	2	435.200	4.662	2.700	0.000
1.000					
CH20HCH2CHO	2	503.072	5.339	1.670	7.016
1.000					
C4H602	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
FURFURAL	2	524.690	5.653	0.000	0.000
1.000					
C5H804	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C6H603	2	567.841	5.915	0.000	0.000
1.000					
C6H804	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C6H1005	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
C8H1003	2	621.100	5.640	0.000	0.000
1.000					
C9H1002	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
C11H1204	2	663.45	6.362	0.000	0.000
1.000					
C4H30	2	425.929	5.015	0.000	0.000
1.000					
HC00H	2	470.6	3.855	0.000	0.000
1.000					
ACETOL	2	503.072	5.339	1.670	7.016
1.000					
GLYCEROL	2	748.365	5.200	1.93	9.43
1.000					
CH2CCHCHO	2	362.600	4.530	0.000	0.000
1.500					
KEHYBU1	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
RBU100X	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
QBU100X	2	496.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
ZBU100X	2	496.000	5.200	0.000	0.000

1.000					
DMF	2	524.828	5.653	0.000	0.000
1.000 !NANCY					
DMF-3YL	2	521.629	5.634	0.000	0.000
1.000 !NANCY					
MEFU2	2	478.946	5.364	0.000	0.000
1.000 !NANCY					
C4H40	2	429.630	5.040	0.000	0.000
1.000 !NANCY					
C3H50	2	424.600	4.820	0.000	0.000
1.000					
RALD3G	2	411.000	4.820	0.000	0.000
1.000					
RALD3B	2	411.000	4.820	0.000	0.000
1.000					
! Kik					
C6H50C6H5	2	676.5	6.310	0.000	0.000
1.000			! Difenet		
C6H5CHCH3	2	546.200	6.000	0.000	0.000
1.000 !C8H9					
RCYC6H9	2	468.500	5.230	0.000	10.30
1.000 !CYC6H9					
BIN1C	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000
1.000					
BIN2A	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN2B	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN2C	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN3A	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN3B	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN3C	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN4A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN4B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN4C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					

BIN7A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN7B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN7C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN9A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN9B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN9C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					

BIN16A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN16B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN16C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN17A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN17B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN17C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN18A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN18B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN18C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN19A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN19B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN19C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN20A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN20B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN20C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN21A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN21B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN21C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN22A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN22B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN22C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN23A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN23B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN23C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN24A 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN24B 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
BIN24C 1.000	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000

BIN25A	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN25B	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN25C	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN1AJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000
1.000					
BIN1BJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000
1.000					
BIN1CJ	2	951.6850	8.4710	0.000	0.000
1.000					
BIN2AJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN2BJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN2CJ	2	1371.0300	10.6500	0.000	0.000
1.000					
BIN3AJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN3BJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN3CJ	2	1964.0700	13.4100	0.000	0.000
1.000					
BIN4AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN4BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN4CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN5CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN6CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN7AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN7BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN7CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN8CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					

BIN9AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN9BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN9CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN10CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN11CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN12CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN13CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN14CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN15CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN16AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN16BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN16CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN17AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN17BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN17CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					

BIN18AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN18BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN18CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN19AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN19BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN19CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN20AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN20BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN20CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN21AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN21BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN21CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN22AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN22BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN22CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN23AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN23BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN23CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN24AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN24BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN24CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN25AJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN25BJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
BIN25CJ	2	2802.7600	16.8800	0.000	0.000
1.000					
C6H4C2H3	2	546.200	6.000	0.000	0.000
1.000 !blanquart					
! A1C2H3*	2	546.2	6.00	0.13	15.00
1.000 !KAUST					
Benzofulvene	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 !Qi					

naphthyne12	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 !Qi					
naphthyne23	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 !Qi					
C6H4(C2H)2	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 !Qi					
naphthyl2H	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 ! assume C10H9 Qi					
C6H5CHCHCH	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 ! assume C10H9 Qi					
C6H5CHCHCCH	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 ! assume c10h8					
C6H4C2HC2H3	2	630.400	6.180	0.000	16.50
1.000 ! assume c10h8					
Benzofulvenyl	2	630.4	6.18	0.00	16.50
1.000					
C7H6	2	495.3	5.68	0.43	12.30
1.000 !=A1CH2					
C7H5	2	495.3	5.68	0.43	12.30
1.000 !=A1CH2					
CYC5H4	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C5H4	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C5H2	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C5H3	1	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000					
C5H5CH3	2	408.000	5.200	0.000	0.000
1.000 ! =c5h6, mc 06/2005					
C7H7O2	2	572	5.82	1.7	0.0
1.0					
BZC00H	2	572	5.82	1.7	0.0
1.0					
O2C6H4CH3	2	572	5.82	1.7	0.0
1.0 ! =C7H7O2					
OC6H4CH2	2	567	5.6	1.6	0.0
1.000					
C6H5CH2O	2	495.3	5.68	0.43	12.30
1.000					
C7H7	2	495.3	5.68	0.43	12.30
1.000 !					
C6H5O2	2	464.800	5.290	0.000	10.320
0.000 !					
C6H5CO	2	593	5.5	2.8	0.0
1.0					
STILB	2	772.0	6.960	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
C14H13O	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
C14H12O	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
RBBENZOO	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					



RBBENZOOH	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
QBBENZOOH	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
KHYBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
RBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL =c14h14					
ZBBENZ	2	783.800	6.640	0.000	0.000
1.000 ! LNLL					
!					
C5H110H	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD		pentanol-1	Togb\E8	Pentanol	
C5H90H	2	482.146	5.008	1.66	6.74
1.000 !ESTD		pentenols	Togb\E8	Pentanol	
RPENT10	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD		pentanol radicals	Togb\E8	Pentanol	
RPENT10HA	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD			Togb\E8	Pentanol	
RPENT10HB	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD			Togb\E8	Pentanol	
RPENT10HC	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD			Togb\E8	Pentanol	
RPENT10HD	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD			Togb\E8	Pentanol	
RPENT10HE	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000 !ESTD			Togb\E8	Pentanol	
KEHYP10H	2	524.200	5.649	1.67	10.42
1.000 !Heufer		NUIG			
RPENT100X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000 !Heufer		NUIG			
QPENT100X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000 !Heufer		NUIG			
ZPENT100X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000 !Heufer		NUIG			
IC5H110H	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0		!da Sarathy TUTTO	iso-pentanol,		SMS
calc ic5h11oh					
RIPENT0HA	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0 !SMS		calc ic5h11oh			
RIPENT0HB	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0					
RIPENT0HC	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0 !SMS		calc ic5h11oh			
RIPENT0HD	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0 !SMS		calc ic5h11oh			
RIPENT0	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0 !SMS		calc ic5h11oh			
IC5H90H	2	514.8	5.649	1.67	10.42
1.0 !SMS		calc ic5h11oh			
IC4H9CHO	2	476.0	5.778	2.6	0.0
1.0 !=C4H9CHO					
KEHYIPOH	2	524.200	5.649	1.67	10.42
1.000 !Heufer		NUIG			

RIPENT00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000	!Heufer NUIG				
QIPENT00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000	!Heufer NUIG				
ZIPENT00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42
1.000	!Heufer NUIG				
!					
RALD5X	2	476.000	5.778	2.600	0.000
1.000	!=C4H9CHO ERA ERC4H8CHO				
ALDC6	2	476.0	5.778	2.6	0.0
1.0	!=C4H9CHO				
HEXENOL	2	482.146	5.008	1.66	6.74
1.000	!=HEXENOL				
RALD6X	2	476.000	5.778	2.600	0.000
1.000	!=C4H9CHO				
ESAN10H	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!=PENTANOL. SAME FOR RADICALS				
RESAN10	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD pentanol radicals Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HA	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HB	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HC	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HD	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HE	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
RESAN10HF	2	503.072	5.339	1.67	8.88
1.000	!ESTD Togb\E8 Pentanol				
C3H5CHO	2	464.200	5.009	2.600	0.000
1.000					
RNC30H00X	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
QNC30H00X	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
ZNC30H00X	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
KEHYNC30H	2	487.900	4.820	0.000	0.000
1.000					
!					
C5EN-00	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
C5EN-Q00H	2	508.000	5.200	0.000	0.000
1.000					
!					
NC10M00H	2	640.980	7.150	0.000	0.000
1.000	!Q100X				
!					
CYC6H10-ONE	2	568.500	5.230	0.000	10.30
1.000					
!					
MLIN100H	2	750.000	8.350	0.000	0.000

1.000	!R160X					
MLIN00H	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMLIN10H	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMLIN10H00	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMEOLEOH	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
RMEOLEOH00	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!R160X					
!						
ALD9	2	540.980	7.150	0.000	0.000	
1.000						
MEALD9	2	540.980	7.150	0.000	0.000	
1.000						
MEALDU12	2	540.980	7.150	0.000	0.000	
1.000						
!						
KMCYC6	2	595.300	5.680	0.430	12.30	
1.000						
!						
HEXENAL	2	476.0	5.778	2.600	0.000	
1.000		!	*			
!						
KEHYC60H	2	524.200	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
RC60H00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
QC60H00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
ZC60H00X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
!						
KEA6X	2	524.200	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
RALD6X00	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
QA6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
ZA6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
ETALD6X	2	524.2	5.649	1.67	10.42	
1.000	!Same as	pentanol	Heufer	NUIG		
!						
C24H2804	2	750.000	8.350	0.000	0.000	
1.000	!same as	MSTEA				
!						
CATECHOL	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
1.000 !	A CASO VANNO	STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE		
C7H603	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
1.000 !	A CASO VANNO	STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE		
RC7H503	2	450.000	5.500	0.000	0.000	
1.000 !	A CASO VANNO	STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE		

C8H6O3	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!					
RCATEC	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!					
GUAIACOL	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
RGUAIPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!					
SALICALD	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
RSALICPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!					
VANILLIN	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
VANILLIN	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!					
C6H4O	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	same as	c6h5o			
CHOCH2CHO	2	435.200	4.662	2.700	0.000
1.000					
!					
RPHENPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
RCATEPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
RANISPH	2	450.000	5.500	0.000	0.000
1.000 !	A	CASO VANNO STIMATE	UNA VOLTA	PER TUTTE	
!+++++					
+++++					
!NOx MODULE (to be updated - from Vernier thesis)					
!+++++					
+++++					
NO	1	97.500	3.621	0.000	1.760
4.000					
N2O	1	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
NO2	2	200.000	3.500	0.000	0.000
1.000					
HNO	2	116.700	3.492	0.000	0.000
1.000					
HNNO	2	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
HNO2	2	200.000	3.500	0.000	0.000
1.000					
HONO	2	200.000	3.500	0.000	0.000
1.000					
HONO2	2	300.000	3.500	0.000	0.000
1.000					
N2H2	2	71.400	3.798	0.000	0.000

1.000					
NH3	2	481.000	2.920	1.470	0.000
10.000					
N2H4	2	205.000	4.230	0.000	4.260
1.500					
HCN	1	569.000	3.630	0.000	0.000
1.000					
HNC	1	569.000	3.630	0.000	0.000
1.000 ! = HCN					
HNCO	2	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
HCNO	2	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
HOCN	2	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
CH3NO	1	97.500	3.621	0.000	1.760
4.000					
CH3ON02	2	300.000	4.500	0.000	0.000
1.000					
CH3ONO	2	200.000	4.500	0.000	0.000
1.000					
CH3ON02	2	300.000	4.500	0.000	0.000
1.000					
CH3CN	1	500.000	4.630	0.000	0.000
1.000					
N	0	71.400	3.298	0.000	0.000
0.000					
NO3	2	300.000	3.500	0.000	0.000
1.000					
NH	1	80.000	2.650	0.000	0.000
4.000					
NNH	2	71.400	3.798	0.000	0.000
1.000					
NH2	2	80.000	2.650	0.000	2.260
4.000					
H2NO	2	116.700	3.492	0.000	0.000
1.000					
N2H3	2	200.000	3.900	0.000	0.000
1.000					
CN	1	75.000	3.856	0.000	0.000
1.000					
NCN	1	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
! Da GRImech 3.0					
NCO	1	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
HNCN	1	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
! Da Konnov 0.6 uguale a HCNN					
H2CN	1	569.000	3.630	0.000	0.000
1.000					
! Da Konnov 0.6 uguale a HCNN					
C2N2	1	349.000	4.361	0.000	0.000
1.000					
! Da Konnov 0.6					
CH2CN	1	232.400	3.828	0.000	0.000
1.000					
CH3NO2	2	200.000	4.500	0.000	0.000

```

1.000
HCNH          1  569.000    3.630    0.000    0.000
1.000 ! = H2CN
C3HN          1  324.800    4.290    0.000    0.000
1.000 ! ! From C3H4
!+++++
+++++
!PYRROLE MODULE
!+++++
+++++
C4H5N         2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H40
PYRLNE        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H40
PYRLYL        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H40
PYROP         2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H40
HNCPROP       2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
A-C3H4CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C-C3H4CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C3H4CN        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
A-C3H5CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C-C3H5CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
T-C3H5CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
CHCHCN        2  290.616    4.368    0.000    0.000
1.000 ! ! From C3H2C
CH2CHCN       2  290.616    4.368    0.000    0.000
1.000 ! ! From C3H2C
C4H4N2        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C4H3N2        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C4H2N2        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
C2H5CN        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C4H4
CH2CH2CN      2  357.000    5.180    0.000    0.000    1.000 !
! From C4H4
CH3CHCN       2  357.000    5.180    0.000    0.000    1.000 !
! From C4H4
RCTN-1        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C-C3H5CN
RCTN-2        2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C-C3H5CN
ROHCTN-2     2  357.000    5.180    0.000    0.000
1.000 ! ! From C-C3H5CN

```

RCTN-4	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000 ! !	From C-C3H5CN				
RACN-2	2	290.616	4.368	0.000	0.000
1.000 ! !	From CH2CHCN				
RACN-3	2	290.616	4.368	0.000	0.000
1.000 ! !	From CH2CHCN				
ROHACN-2	2	290.616	4.368	0.000	0.000
1.000 ! !	From CH2CHCN				
ROHACN-3	2	290.616	4.368	0.000	0.000
1.000 ! !	From CH2CHCN				
C4H4NO2	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000 ! !	From C4H5N				
CH2NH	2	238.400	3.496	0.000	0.000
1.500 ! !	From C2H4				
CH2N	2	238.400	3.496	0.000	0.000
1.500 ! !	From C2H4				
NCCH(3)	1	500.000	4.630	0.000	0.000
1.000 ! !	From CH3CN				
C2N	2	238.400	3.496	0.000	0.000
1.500 ! !	From CH2N				
C4N2	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000 ! !	From C4H4				
IC4H4N2	2	357.000	5.180	0.000	0.000
1.000 ! !	From C4H4N2				