

Supporting Information for:

Don't forget the *trans*: Double-bond isomerism in radical-acetylene growth reactions affects the primary stages of PAH and soot formation

Patricia D. Kelly^a, Jack A. Turner^a, Oisín J. Shiels^a, Gabriel da Silva^b, Stephen J. Blanksby^c,
Berwyck L. J. Poad^c and Adam J. Trevitt^a

^a School of Chemistry and Molecular Bioscience, University of Wollongong, Wollongong, NSW, Australia

^b Department of Chemical Engineering, The University of Melbourne, Melbourne, Victoria, Australia

^c Central Analytical Research Facility and the School of Chemistry and Physics, Queensland University of Technology,
Brisbane, Queensland, Australia

email: adamt@uow.edu.au

SUPPORTING INFORMATION

Future Experimental Verification of C₁₀H₈ Isomer Diversity

The models presented here predict the formation of multiple C₁₀H₈ isomers in addition to naphthalene, and this provides a target for experiments to detect their presence in the Bittner-Howard reaction. The authors have performed mass spectrometric experiments of the reaction at the Chemical Dynamics Beamline at the Advanced Light Source in Berkeley, California near the low temperature and pressure limits of this study, using the methods described in [44]. These experiments are to be the subject of a future publication on the Bittner-Howard reaction. Unfortunately, the experiments were unable to conclusively verify the presence of multiple C₁₀H₈ isomers, which is believed to be for two main reasons. Firstly, the achievable limits of pressure and temperature imposed by the apparatus are at the very low end of the model, at 4 Torr and 550-700 K. This region of the model is one of the few that predicts very little C₁₀H₈ isomerism, with the vast majority of the branching ratio attributed to naphthalene.

Secondly, unlike azulene [26], the ionisation energies of the most common predicted C₁₀H₈ isomers are very similar to that of naphthalene, as presented in Table S1. The resolution of the instrument combined with the gradual onset of ionisation as energy increases prevents conclusive assignment of the C₁₀H₈ signal. Future experiments with greater precision in detecting the ionisation energy of these reaction products, such as PEPICO, will be vital in verifying or refuting the model presented in this study.

Table S1. CBS-QB3 adiabatic ionisation energies for the five significant C₁₀H₈ species predicted by the model.

Species	Adiabatic Ionisation Energy (eV)
BZFB	8.11
NAPH	8.17
<i>E</i> -EPE	8.21
PVAC	8.22
<i>Z</i> -EPE	8.26

Table S2. M06-2X and G3X-K energies for all intermediates, products and transition states included in the model. Labels for each stationary point are as listed in Figure 2. All energies are in kcal/mol, with the Z- β -styryl radical (Z- β S) chosen as the reference energy.

Well	M06-2X	G3X-K	Well	M06-2X	G3X-K	Well	M06-2X	G3X-K
<i>E-i1</i>	-43.54	-39.69	Z-i15	-40.55	-38.13	i38	-60.05	-55.13
Z-i1	-43.07	-38.95	i16	-32.25	-23.60	i39	-86.34	-83.16
<i>E-i2</i>	-41.10	-38.68	i24	-4.25	-4.50	i40	-39.57	-36.64
Z-i2	-40.73	-37.96	i25	-70.16	-65.71	i41	-51.06	-48.43
i4	-54.45	-50.95	i26	-63.24	-62.16	i42	-84.04	-79.86
i5	-68.86	-66.97	i27	-78.28	-69.67	i45	-96.44	-90.75
i6	-50.19	-48.45	i28	-90.09	-85.61	E-βS	0.00	-0.97
i7	-43.98	-38.99	i29	-62.21	-55.93	Z-βS	0.00	0.00
i8	-42.51	-37.72	i31	-35.47	-27.37	p1	-1.09	0.10
i9	-94.84	-90.24	E-i32	-41.41	-39.18	p2	-66.64	-61.45
i10	-59.86	-56.35	Z-i32	-40.12	-37.69	p3	-10.05	-7.19
i11	-58.67	-54.99	i33	-19.60	-13.73	p4	-12.04	-8.71
i12	-45.69	-42.39	i34	-21.42	-21.37	p5	-5.55	-1.22
i13	-50.12	-45.87	i35	-24.90	-23.65	p6	-9.26	-6.43
i14	-21.96	-17.01	i36	-40.85	-38.50	p8	-43.44	-40.07
E-i15	-40.06	-37.80	i37	-42.43	-37.59	p10	-9.37	-6.91

TS	...connects...		M06-2X	G3X-K	TS	...connects...		M06-2X	G3X-K
t1	Z- β S	Z-i1	4.05	3.48	t45	i4	i10	-5.96	0.50
t2	E- β S	Z-i2	3.79	3.17	t46	E-i15	Z-i15	-35.70	-33.62
t3	E-i1	Z-i1	-39.10	-35.98	t64	i24	p1	N/A	N/A
t4	E-i2	Z-i2	-36.57	-34.72	t65	i8	i25	-33.95	-32.87
t5	E-i1	i4	1.40	5.42	t66	i11	i26	-31.85	-31.27
t6	E-i2	i4	3.01	6.45	t67	i25	p8	-36.95	-35.13
t8	i4	i24	-0.73	-0.56	t68	i26	p8	-36.64	-35.62
t9	E-i2	i5	-32.81	-30.82	t69	i10	p5	-1.22	5.43
t10	i5	p2	-54.95	-50.77	t70	i25	i27	-61.84	-58.58
t11	E-i1	i6	-13.38	-11.87	t71	i27	i28	-60.29	-56.79

t12	i4	i6	-2.42	2.38	t72	i28	p2	-60.76	-53.55
t13	Z-i1	Z-i2	0.14	6.52	t73	i25	i29	-55.90	-52.18
t14	E-i1	E-i2	10.14	13.77	t74	i9	i29	-55.76	-51.39
t15	E-i1	p3	-4.21	-5.24	t76	i25	i26	-43.48	-39.04
t16	i6	p4	-7.67	-6.17	t77	E-i2	i31	-19.32	-17.34
t17	i4	p4	-7.42	-5.26	t78	E-i1	i31	-20.66	-18.90
t18	i4	p5	-0.27	6.75	t79	i25	E-i32	-36.48	-36.31
t20	i7	i8	5.78	8.77	t80	E-i32	Z-i32	-37.00	-35.38
t21	i8	i9	-35.54	-32.49	t81	i28	E-i32	-35.13	-33.22
t22	i9	p2	-61.63	-56.75	t82	E-i32	p10	-2.60	-1.50
t23	Z-i1	i10	-0.75	3.06	t83	E-i32	i33	-14.07	-12.05
t24	Z-i2	i11	-0.03	4.33	t84	E-i32	i34	-2.00	-2.47
t25	i10	i11	-50.06	-48.04	t85	E-i32	i35	-6.41	-5.74
t26	i8	i11	-32.04	-28.53	t86	E-i15	i36	-13.36	-12.63
t27	E-i2	i8	-31.42	-29.86	t87	i36	i37	-22.32	-20.21
t30	E-i1	i13	-14.23	-11.63	t88	i36	i38	-12.65	-11.38
t31	E-i2	i13	-6.56	-3.87	t89	i36	i39	-28.16	-28.53
t32	i10	p3	-7.20	-4.95	t90	E-i32	i40	-13.12	-12.29
t33	i11	p6	-6.53	-5.48	t91	E-i32	i41	-31.45	-30.85
t34	E-i2	p6	-2.56	-2.63	t92	i41	i42	-32.94	-31.23
t35	i7	i12	-8.60	-6.75	t93	i42	p8	-40.25	-37.70
t36	i8	i12	-5.03	-3.42	t94	i37	i39	-23.39	-19.08
t37	i4	i11	-5.22	2.01	t95	i37	i42	-24.16	-20.84
t39	Z-i15	i24	3.00	1.85	t98	i39	i42	-52.01	-46.60
t40	i14	E-i15	-17.08	-16.24	t99	i39	p8	-40.25	-38.68
t41	i4	i14	-18.71	-15.48	t100	i37	i41	-26.15	-25.00
t42	i4	i7	-17.97	-16.29	t101	i25	i42	-47.14	-42.40
t43	Z-i15	i16	-20.97	-19.42	t102	i25	i45	-45.81	-41.51
t44	i6	i16	-23.77	-19.22	t103	i45	p8	-42.09	-41.36*

* this step has a submerged barrier with G3X-K energies, though not with M06-2X energies. No post-reactive complex was locatable, so t103 was treated as a zero-height barrier from the isolated products (-40.07 kcal/mol). This approximation was deemed sufficient as the flux across t103 was low.

Table S3. Branching ratios for all 48 species under all 30 sets of temperature and pressure conditions. *trans*, *cis* and the weighted average of these are each listed.

T (K)	P (Pa)	iso	E-i1	Z-i1	E-i2	Z-i2	i4	i5	i6	i7	i8	i9	i10	i11	i12	i13	i14	E-i15	
550	533	<i>trans</i>	3.71E-5	2.18E-5	0.00E+0	0.00E+0	6.86E-3	0.00E+0	2.89E-2	5.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	7.00E-7	1.00E-7	4.60E-6	3.43E-3	0.00E+0	3.15E-5	
		<i>cis</i>	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.18E-4	0.00E+0	3.65E-4	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	3.89E-5	0.00E+0	3.00E-7
		<i>mix</i>	2.17E-5	1.29E-5	0.00E+0	0.00E+0	4.07E-3	0.00E+0	1.71E-2	3.28E-6	0.00E+0	0.00E+0	4.10E-7	5.86E-8	2.78E-6	2.03E-3	0.00E+0	1.86E-5	
	10 ⁴	<i>trans</i>	4.97E-2	3.07E-2	6.00E-7	3.00E-7	1.06E-3	0.00E+0	4.49E-2	2.90E-6	0.00E+0	2.63E-5	1.54E-3	4.90E-4	1.00E-7	8.86E-3	0.00E+0	1.22E-4	
		<i>cis</i>	4.07E-4	2.55E-4	0.00E+0	0.00E+0	2.85E-5	0.00E+0	7.58E-4	0.00E+0	0.00E+0	5.70E-6	1.08E-3	3.30E-4	2.00E-7	1.57E-4	0.00E+0	2.70E-6	
		<i>mix</i>	2.93E-2	1.81E-2	3.52E-7	1.76E-7	6.36E-4	0.00E+0	2.66E-2	1.70E-6	0.00E+0	1.78E-5	1.35E-3	4.24E-4	1.41E-7	5.26E-3	0.00E+0	7.25E-5	
	10 ⁵	<i>trans</i>	3.72E-1	2.33E-1	5.20E-6	2.60E-6	5.32E-5	8.00E-7	2.01E-2	1.00E-7	3.00E-7	3.35E-3	6.93E-3	2.33E-3	1.00E-7	4.29E-3	0.00E+0	8.03E-5	
		<i>cis</i>	4.71E-3	2.97E-3	1.00E-7	0.00E+0	1.40E-6	0.00E+0	4.01E-4	0.00E+0	0.00E+0	4.14E-3	1.89E-2	6.11E-3	0.00E+0	9.46E-5	0.00E+0	1.40E-6	
		<i>mix</i>	2.20E-1	1.38E-1	3.09E-6	1.52E-6	3.18E-5	4.69E-7	1.20E-2	5.86E-8	1.76E-7	3.68E-3	1.19E-2	3.89E-3	5.86E-8	2.55E-3	0.00E+0	4.77E-5	
	10 ⁶	<i>trans</i>	5.77E-1	3.63E-1	1.39E-5	1.03E-5	3.00E-7	2.60E-6	3.16E-3	0.00E+0	2.00E-7	5.58E-3	1.69E-3	5.90E-4	0.00E+0	6.81E-4	0.00E+0	5.40E-6	
		<i>cis</i>	7.87E-3	4.99E-3	9.00E-7	1.30E-6	0.00E+0	3.00E-7	6.98E-5	0.00E+0	0.00E+0	9.66E-2	3.21E-2	1.05E-2	2.00E-7	1.70E-5	0.00E+0	3.00E-7	
		<i>mix</i>	3.42E-1	2.15E-1	8.52E-6	6.58E-6	1.76E-7	1.65E-6	1.88E-3	0.00E+0	1.17E-7	4.32E-2	1.43E-2	4.70E-3	8.28E-8	4.06E-4	0.00E+0	3.29E-6	
	10 ⁷	<i>trans</i>	6.10E-1	3.84E-1	3.90E-4	2.54E-4	0.00E+0	2.20E-4	3.36E-4	0.00E+0	7.00E-6	8.08E-4	1.41E-4	4.86E-5	0.00E+0	6.88E-5	0.00E+0	1.00E-7	
		<i>cis</i>	4.86E-3	3.09E-3	4.80E-2	3.15E-2	0.00E+0	3.11E-2	3.60E-6	0.00E+0	7.83E-4	1.39E-1	2.57E-2	8.90E-3	0.00E+0	1.90E-6	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	3.59E-1	2.26E-1	2.01E-2	1.32E-2	0.00E+0	1.30E-2	1.98E-4	0.00E+0	3.28E-4	5.78E-2	1.07E-2	3.71E-3	0.00E+0	4.11E-5	0.00E+0	5.86E-8	
	800	533	<i>trans</i>	6.00E-7	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.33E-3	0.00E+0	2.67E-3	3.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.30E-6	1.02E-4	0.00E+0	5.10E-6
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.27E-5	0.00E+0	4.80E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	1.10E-6	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	3.42E-7	2.28E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.35E-3	0.00E+0	1.54E-3	1.99E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.49E-6	5.85E-5	0.00E+0	2.90E-6
10 ⁴		<i>trans</i>	3.12E-4	2.22E-4	0.00E+0	1.00E-7	6.15E-3	0.00E+0	3.02E-2	1.40E-5	0.00E+0	1.00E-7	1.51E-5	5.60E-6	7.40E-6	3.74E-3	0.00E+0	7.31E-5	
		<i>cis</i>	3.90E-6	1.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	2.58E-4	0.00E+0	9.78E-4	7.00E-7	0.00E+0	1.00E-7	6.50E-6	2.30E-6	8.00E-7	1.11E-4	0.00E+0	1.80E-6	
		<i>mix</i>	1.79E-4	1.27E-4	0.00E+0	5.69E-8	3.61E-3	0.00E+0	1.76E-2	8.27E-6	0.00E+0	1.00E-7	1.14E-5	4.18E-6	4.56E-6	2.18E-3	0.00E+0	4.24E-5	
10 ⁵		<i>trans</i>	3.46E-2	2.42E-2	1.08E-5	9.90E-6	2.54E-3	1.30E-6	5.88E-2	1.33E-5	4.00E-7	2.96E-4	3.20E-3	1.29E-3	2.40E-6	1.22E-2	0.00E+0	2.39E-4	
		<i>cis</i>	7.65E-4	5.40E-4	2.00E-7	3.00E-7	1.64E-4	1.00E-7	2.59E-3	5.00E-7	0.00E+0	7.06E-5	2.79E-3	1.06E-3	1.30E-6	5.49E-4	0.00E+0	9.50E-6	
		<i>mix</i>	2.00E-2	1.40E-2	6.23E-6	5.76E-6	1.52E-3	7.83E-7	3.46E-2	7.79E-6	2.28E-7	1.99E-4	3.02E-3	1.19E-3	1.93E-6	7.19E-3	0.00E+0	1.40E-4	
10 ⁶		<i>trans</i>	3.14E-1	2.24E-1	2.03E-4	1.72E-4	1.92E-4	2.87E-5	3.37E-2	9.00E-7	9.90E-6	1.07E-2	1.13E-2	4.69E-3	9.00E-7	8.40E-3	0.00E+0	1.92E-4	
		<i>cis</i>	1.14E-2	8.16E-3	8.50E-6	6.50E-6	2.11E-5	1.10E-6	1.81E-3	1.00E-7	2.00E-7	1.80E-2	2.81E-2	1.13E-2	1.90E-6	5.08E-4	0.00E+0	1.07E-5	
		<i>mix</i>	1.83E-1	1.31E-1	1.19E-4	1.01E-4	1.18E-4	1.68E-5	2.00E-2	5.55E-7	5.72E-6	1.38E-2	1.86E-2	7.55E-3	1.33E-6	5.00E-3	0.00E+0	1.14E-4	
10 ⁷		<i>trans</i>	5.38E-1	3.86E-1	7.94E-4	6.24E-4	3.80E-6	1.59E-4	5.77E-3	1.00E-7	3.66E-5	8.20E-3	2.59E-3	1.09E-3	0.00E+0	1.50E-3	0.00E+0	1.44E-5	
		<i>cis</i>	1.92E-2	1.38E-2	9.61E-4	7.04E-4	1.50E-6	4.11E-4	2.60E-4	1.00E-7	3.03E-5	1.24E-1	4.06E-2	1.65E-2	9.00E-7	1.02E-4	0.00E+0	1.10E-6	
		<i>mix</i>	3.14E-1	2.26E-1	8.66E-4	6.58E-4	2.81E-6	2.67E-4	3.40E-3	1.00E-7	3.39E-5	5.82E-2	1.90E-2	7.72E-3	3.88E-7	8.96E-4	0.00E+0	8.67E-6	

T (K)	P (Pa)	iso	Z-i15	i16	i24	i25	i26	i27	i28	i29	i31	E-i32	Z-i32	i33	i34	i35	i36	i37		
550	533	<i>trans</i>	4.04E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>cis</i>	3.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	2.38E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.86E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	1.51E-4	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.20E-6	0.00E+0	3.60E-5	0.00E+0	6.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	5.90E-6	0.00E+0	1.80E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	8.96E-5	0.00E+0	0.00E+0	4.14E-8	7.25E-6	0.00E+0	2.86E-5	0.00E+0	3.52E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.14E-4	0.00E+0	0.00E+0	1.60E-6	1.10E-4	7.00E-7	2.78E-3	0.00E+0	9.80E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	3.00E-7	2.89E-4	0.00E+0	2.75E-3	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	6.76E-5	0.00E+0	0.00E+0	1.06E-6	1.84E-4	4.10E-7	2.77E-3	0.00E+0	5.79E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁶	<i>trans</i>	7.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	3.30E-6	5.55E-5	1.40E-6	7.25E-3	0.00E+0	1.53E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.37E-5	1.02E-3	2.00E-5	1.19E-1	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	
		<i>mix</i>	4.54E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.17E-5	4.55E-4	9.10E-6	5.36E-2	0.00E+0	9.01E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.14E-8	
	10 ⁷	<i>trans</i>	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.35E-4	3.90E-6	3.95E-5	1.20E-3	0.00E+0	2.72E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.86E-2	6.02E-4	6.74E-3	2.12E-1	1.10E-6	8.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.17E-7	0.00E+0	0.00E+0	7.76E-3	2.51E-4	2.81E-3	8.85E-2	4.55E-7	1.63E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	800	533	<i>trans</i>	5.80E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
			<i>cis</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	3.34E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
10 ⁴		<i>trans</i>	1.03E-4	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	1.00E-7	8.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	3.40E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	6.00E-5	1.14E-7	0.00E+0	4.31E-8	1.57E-7	5.69E-8	4.55E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁵		<i>trans</i>	3.15E-4	0.00E+0	0.00E+0	5.90E-6	4.11E-5	5.00E-7	2.98E-4	0.00E+0	6.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.35E-5	0.00E+0	0.00E+0	6.00E-7	3.55E-5	2.00E-7	1.24E-4	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.85E-4	0.00E+0	0.00E+0	3.62E-6	3.87E-5	3.71E-7	2.23E-4	0.00E+0	3.47E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁶		<i>trans</i>	2.62E-4	1.00E-7	0.00E+0	9.54E-5	2.73E-4	1.16E-5	9.94E-3	0.00E+0	8.97E-5	1.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.49E-5	0.00E+0	0.00E+0	2.18E-5	6.68E-4	5.00E-6	1.43E-2	0.00E+0	2.70E-6	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	
		<i>mix</i>	1.56E-4	5.69E-8	0.00E+0	6.37E-5	4.43E-4	8.76E-6	1.18E-2	0.00E+0	5.22E-5	5.69E-8	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.14E-7	4.31E-8	
10 ⁷		<i>trans</i>	2.18E-5	0.00E+0	0.00E+0	3.26E-4	1.10E-4	3.94E-5	1.12E-2	1.00E-7	1.74E-4	2.00E-7	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.13E-3	1.78E-3	2.56E-4	1.71E-1	0.00E+0	7.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	7.00E-7	
		<i>mix</i>	1.29E-5	0.00E+0	0.00E+0	6.73E-4	8.28E-4	1.33E-4	7.99E-2	5.69E-8	1.02E-4	1.14E-7	1.14E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.31E-8	3.02E-7	

T (K)	P (Pa)	iso	i38	i39	i40	i41	i42	i45	E-βS	Z-βS	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p8	p10	
550	533	<i>trans</i>	2.50E-6	1.60E-5	0.00E+0	0.00E+0	4.70E-6	2.42E-3	6.90E-6	3.52E-4	3.22E-4	9.09E-1	1.11E-2	8.66E-3	0.00E+0	5.00E-5	2.85E-2	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.00E-7	2.70E-6	0.00E+0	0.00E+0	9.00E-7	2.51E-3	7.50E-6	1.17E-5	1.08E-5	9.68E-1	2.69E-4	2.12E-4	0.00E+0	5.68E-5	2.84E-2	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.51E-6	1.05E-5	0.00E+0	0.00E+0	3.13E-6	2.46E-3	7.15E-6	2.11E-4	1.93E-4	9.34E-1	6.61E-3	5.16E-3	0.00E+0	5.28E-5	2.85E-2	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	6.00E-7	1.88E-3	1.00E-7	0.00E+0	7.00E-4	8.44E-3	6.80E-6	3.16E-4	2.33E-5	8.25E-1	9.35E-3	9.36E-4	0.00E+0	3.94E-5	1.54E-2	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	2.01E-3	1.00E-7	0.00E+0	7.14E-4	1.05E-2	8.10E-6	1.07E-5	8.00E-7	9.64E-1	2.47E-4	3.17E-5	1.00E-7	5.32E-5	1.94E-2	0.00E+0	
		<i>mix</i>	3.52E-7	1.93E-3	1.00E-7	0.00E+0	7.05E-4	9.29E-3	7.34E-6	1.89E-4	1.40E-5	8.83E-1	5.58E-3	5.62E-4	4.14E-8	4.51E-5	1.71E-2	0.00E+0	
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.00E-7	1.59E-3	0.00E+0	5.00E-7	1.43E-3	3.71E-3	3.40E-6	1.62E-4	1.50E-6	3.41E-1	4.17E-3	5.40E-5	0.00E+0	1.82E-5	2.77E-3	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	4.76E-3	1.00E-7	1.00E-6	3.95E-3	1.09E-2	7.70E-6	4.60E-6	0.00E+0	9.32E-1	1.15E-4	2.00E-6	0.00E+0	5.11E-5	8.29E-3	1.00E-7	
		<i>mix</i>	5.86E-8	2.90E-3	4.14E-8	7.07E-7	2.48E-3	6.70E-3	5.18E-6	9.66E-5	8.79E-7	5.85E-1	2.49E-3	3.25E-5	0.00E+0	3.18E-5	5.05E-3	4.14E-8	
	10 ⁶	<i>trans</i>	0.00E+0	5.38E-5	1.00E-7	6.80E-6	3.68E-4	4.18E-4	1.00E-6	2.95E-5	0.00E+0	3.90E-2	6.86E-4	4.00E-7	0.00E+0	1.90E-6	1.01E-4	1.00E-7	
		<i>cis</i>	0.00E+0	9.49E-4	3.00E-7	1.20E-4	7.13E-3	7.86E-3	7.90E-6	1.30E-6	0.00E+0	7.10E-1	1.70E-5	0.00E+0	0.00E+0	3.29E-5	1.86E-3	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	4.24E-4	1.83E-7	5.38E-5	3.17E-3	3.50E-3	3.86E-6	1.78E-5	0.00E+0	3.17E-1	4.09E-4	2.34E-7	0.00E+0	1.47E-5	8.28E-4	5.86E-8	
	10 ⁷	<i>trans</i>	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	3.00E-7	1.58E-5	1.34E-5	0.00E+0	2.70E-6	0.00E+0	2.62E-3	7.02E-5	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	1.10E-6	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	2.16E-5	0.00E+0	8.67E-5	2.67E-3	2.51E-3	4.50E-6	1.00E-7	0.00E+0	4.64E-1	8.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.52E-5	2.38E-4	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	9.06E-6	0.00E+0	3.61E-5	1.11E-3	1.05E-3	1.86E-6	1.62E-6	0.00E+0	1.94E-1	4.15E-5	0.00E+0	0.00E+0	6.41E-6	9.90E-5	0.00E+0	
	800	533	<i>trans</i>	3.40E-6	1.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.07E-4	3.62E-4	7.82E-3	3.91E-3	8.18E-1	5.96E-2	5.01E-2	2.20E-6	1.03E-3	5.40E-2	6.00E-7
			<i>cis</i>	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.02E-4	5.35E-4	5.82E-4	2.27E-4	9.34E-1	4.03E-3	2.58E-3	2.30E-6	1.35E-3	5.66E-2	1.50E-6
			<i>mix</i>	2.02E-6	6.26E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.05E-4	4.36E-4	4.70E-3	2.32E-3	8.68E-1	3.57E-2	2.96E-2	2.24E-6	1.17E-3	5.51E-2	9.88E-7
10 ⁴		<i>trans</i>	1.01E-5	1.88E-4	0.00E+0	0.00E+0	6.32E-5	5.80E-3	3.40E-4	7.65E-3	2.14E-3	8.10E-1	5.84E-2	2.87E-2	1.70E-6	9.93E-4	4.55E-2	1.50E-6	
		<i>cis</i>	3.00E-7	1.02E-4	0.00E+0	0.00E+0	3.12E-5	6.30E-3	5.17E-4	5.65E-4	1.58E-4	9.33E-1	3.94E-3	1.75E-3	1.70E-6	1.36E-3	5.09E-2	1.00E-6	
		<i>mix</i>	5.88E-6	1.51E-4	0.00E+0	0.00E+0	4.94E-5	6.01E-3	4.16E-4	4.60E-3	1.29E-3	8.63E-1	3.49E-2	1.71E-2	1.70E-6	1.15E-3	4.78E-2	1.28E-6	
10 ⁵		<i>trans</i>	4.90E-6	3.07E-3	3.00E-7	0.00E+0	1.32E-3	1.33E-2	3.17E-4	6.80E-3	5.01E-4	7.50E-1	5.12E-2	7.36E-3	8.00E-7	8.53E-4	2.68E-2	9.00E-7	
		<i>cis</i>	1.20E-6	3.37E-3	2.00E-7	0.00E+0	1.37E-3	1.74E-2	5.14E-4	5.10E-4	4.25E-5	9.27E-1	3.56E-3	5.68E-4	1.90E-6	1.28E-3	3.58E-2	1.50E-6	
		<i>mix</i>	3.31E-6	3.20E-3	2.57E-7	0.00E+0	1.34E-3	1.51E-2	4.02E-4	4.09E-3	3.04E-4	8.26E-1	3.07E-2	4.43E-3	1.27E-6	1.04E-3	3.07E-2	1.16E-6	
10 ⁶		<i>trans</i>	6.00E-7	2.22E-3	6.00E-7	9.80E-6	3.01E-3	6.55E-3	1.73E-4	3.58E-3	3.27E-5	3.35E-1	2.52E-2	5.74E-4	5.00E-7	3.75E-4	5.07E-3	4.00E-7	
		<i>cis</i>	0.00E+0	6.21E-3	2.60E-6	1.60E-5	7.87E-3	1.79E-2	4.78E-4	2.69E-4	3.00E-6	8.56E-1	1.79E-3	4.53E-5	9.00E-7	1.05E-3	1.40E-2	1.30E-6	
		<i>mix</i>	3.42E-7	3.94E-3	1.46E-6	1.25E-5	5.10E-3	1.14E-2	3.04E-4	2.15E-3	1.99E-5	5.60E-1	1.51E-2	3.46E-4	6.72E-7	6.67E-4	8.93E-3	7.88E-7	
10 ⁷		<i>trans</i>	0.00E+0	5.62E-5	1.00E-7	2.33E-5	5.75E-4	6.26E-4	2.40E-5	6.74E-4	2.00E-7	3.73E-2	4.44E-3	1.29E-5	0.00E+0	5.15E-5	1.82E-4	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	7.96E-4	1.50E-6	4.20E-4	9.70E-3	1.04E-2	3.43E-4	4.05E-5	0.00E+0	5.84E-1	2.57E-4	8.00E-7	0.00E+0	7.13E-4	2.84E-3	3.00E-7	
		<i>mix</i>	0.00E+0	3.75E-4	7.03E-7	1.94E-4	4.51E-3	4.84E-3	1.61E-4	4.01E-4	1.14E-7	2.73E-1	2.64E-3	7.69E-6	0.00E+0	3.36E-4	1.33E-3	1.29E-7	

T (K)	P (Pa)	iso	E-i1	Z-i1	E-i2	Z-i2	i4	i5	i6	i7	i8	i9	i10	i11	i12	i13	i14	E-i15		
1000	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.43E-4	0.00E+0	9.94E-5	3.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	2.10E-6	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.00E-6	0.00E+0	2.40E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.12E-5	0.00E+0	5.68E-5	1.68E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.12E-7	1.18E-6	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	6.20E-6	5.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	2.17E-3	0.00E+0	5.10E-3	6.80E-6	0.00E+0	1.00E-7	6.00E-7	2.00E-7	5.80E-6	3.24E-4	0.00E+0	2.08E-5		
		<i>cis</i>	4.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.06E-4	0.00E+0	2.01E-4	2.00E-7	0.00E+0	1.00E-7	1.00E-7	1.00E-7	7.00E-7	1.12E-5	0.00E+0	1.50E-6		
		<i>mix</i>	3.65E-6	3.13E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.26E-3	0.00E+0	2.94E-3	3.90E-6	0.00E+0	1.00E-7	3.80E-7	1.56E-7	3.56E-6	1.87E-4	0.00E+0	1.23E-5		
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.39E-3	1.04E-3	1.80E-6	9.00E-7	4.55E-3	1.00E-7	3.35E-2	2.27E-5	1.00E-7	1.10E-5	2.49E-4	1.02E-4	7.60E-6	4.96E-3	0.00E+0	1.83E-4		
		<i>cis</i>	4.23E-5	3.13E-5	1.00E-7	0.00E+0	3.41E-4	0.00E+0	2.07E-3	2.00E-6	0.00E+0	2.70E-6	1.55E-4	6.75E-5	5.90E-6	3.01E-4	0.00E+0	1.18E-5		
		<i>mix</i>	7.95E-4	5.96E-4	1.05E-6	5.04E-7	2.70E-3	5.60E-8	1.97E-2	1.36E-5	5.60E-8	7.35E-6	2.07E-4	8.70E-5	6.85E-6	2.91E-3	0.00E+0	1.08E-4		
	10 ⁶	<i>trans</i>	7.75E-2	5.81E-2	1.80E-4	1.50E-4	1.90E-3	2.38E-5	6.26E-2	1.64E-5	1.19E-5	3.11E-3	1.01E-2	4.48E-3	4.60E-6	1.50E-2	0.00E+0	4.65E-4		
		<i>cis</i>	4.24E-3	3.18E-3	1.07E-5	9.60E-6	2.33E-4	1.20E-6	5.13E-3	2.80E-6	1.20E-6	1.78E-3	1.25E-2	5.37E-3	7.50E-6	1.32E-3	0.00E+0	4.53E-5		
		<i>mix</i>	4.53E-2	3.40E-2	1.05E-4	8.81E-5	1.17E-3	1.39E-5	3.74E-2	1.04E-5	7.20E-6	2.53E-3	1.11E-2	4.87E-3	5.87E-6	8.99E-3	0.00E+0	2.81E-4		
	10 ⁷	<i>trans</i>	3.95E-1	3.00E-1	1.75E-3	1.48E-3	1.16E-4	2.19E-4	2.62E-2	1.10E-6	1.29E-4	1.72E-2	1.05E-2	4.80E-3	1.10E-6	7.19E-3	0.00E+0	1.78E-4		
		<i>cis</i>	2.80E-2	2.14E-2	1.47E-4	1.29E-4	3.00E-5	2.04E-5	2.28E-3	1.40E-6	1.24E-5	6.60E-2	4.36E-2	1.94E-2	8.80E-6	7.81E-4	0.00E+0	1.86E-5		
		<i>mix</i>	2.33E-1	1.78E-1	1.05E-3	8.83E-4	7.79E-5	1.32E-4	1.57E-2	1.23E-6	7.77E-5	3.86E-2	2.50E-2	1.12E-2	4.48E-6	4.37E-3	0.00E+0	1.08E-4		
	1200	533	<i>trans</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.20E-6	0.00E+0	1.90E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	5.55E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.77E-6	0.00E+0	1.05E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁴		<i>trans</i>	3.00E-7	5.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.84E-4	0.00E+0	3.09E-4	1.30E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-7	9.80E-6	0.00E+0	1.30E-6		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	9.00E-6	0.00E+0	1.51E-5	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	6.00E-7	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>mix</i>	1.66E-7	2.77E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.06E-4	0.00E+0	1.78E-4	7.65E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.22E-7	5.70E-6	0.00E+0	7.21E-7		
10 ⁵		<i>trans</i>	4.85E-5	3.62E-5	1.00E-7	0.00E+0	1.54E-3	0.00E+0	6.48E-3	1.25E-5	0.00E+0	5.00E-7	9.70E-6	2.70E-6	5.80E-6	6.12E-4	0.00E+0	4.95E-5		
		<i>cis</i>	2.50E-6	2.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.31E-4	0.00E+0	4.77E-4	8.00E-7	0.00E+0	2.00E-7	5.60E-6	2.20E-6	1.90E-6	4.13E-5	0.00E+0	2.80E-6		
		<i>mix</i>	2.80E-5	2.12E-5	5.55E-8	0.00E+0	9.14E-4	0.00E+0	3.81E-3	7.29E-6	0.00E+0	3.66E-7	7.87E-6	2.48E-6	4.06E-6	3.58E-4	0.00E+0	2.87E-5		
10 ⁶		<i>trans</i>	8.24E-3	6.34E-3	4.14E-5	3.27E-5	3.08E-3	4.60E-6	4.02E-2	3.35E-5	3.80E-6	2.97E-4	2.53E-3	1.13E-3	1.26E-5	8.06E-3	0.00E+0	3.76E-4		
		<i>cis</i>	5.76E-4	4.46E-4	2.70E-6	1.80E-6	4.19E-4	4.00E-7	4.27E-3	5.30E-6	9.00E-7	1.28E-4	2.46E-3	1.06E-3	1.75E-5	9.06E-4	0.00E+0	3.70E-5		
		<i>mix</i>	4.83E-3	3.71E-3	2.42E-5	1.89E-5	1.90E-3	2.73E-6	2.42E-2	2.09E-5	2.51E-6	2.22E-4	2.50E-3	1.10E-3	1.48E-5	4.88E-3	0.00E+0	2.25E-4		
10 ⁷		<i>trans</i>	1.83E-1	1.44E-1	1.83E-3	1.60E-3	9.08E-4	1.90E-4	5.29E-2	1.70E-5	1.66E-4	1.24E-2	1.75E-2	8.39E-3	8.90E-6	1.47E-2	0.00E+0	5.93E-4		
		<i>cis</i>	1.95E-2	1.54E-2	2.16E-4	1.82E-4	2.45E-4	2.11E-5	6.73E-3	6.90E-6	2.83E-5	1.91E-2	3.45E-2	1.59E-2	2.84E-5	2.22E-3	0.00E+0	8.26E-5		
		<i>mix</i>	1.10E-1	8.68E-2	1.11E-3	9.69E-4	6.13E-4	1.15E-4	3.23E-2	1.25E-5	1.05E-4	1.54E-2	2.51E-2	1.17E-2	1.76E-5	9.15E-3	0.00E+0	3.66E-4		

T (K)	P (Pa)	iso	Z-i15	i16	i24	i25	i26	i27	i28	i29	i31	E-i32	Z-i32	i33	i34	i35	i36	i37			
1000	533	<i>trans</i>	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.12E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	2.62E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.70E-6	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.54E-5	4.40E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁵	<i>trans</i>	2.46E-4	1.00E-7	0.00E+0	3.00E-7	3.70E-6	4.00E-7	1.59E-5	0.00E+0	5.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.00E-7	0.00E+0		
		<i>cis</i>	1.57E-5	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.40E-6	0.00E+0	6.00E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>mix</i>	1.45E-4	5.60E-8	0.00E+0	1.68E-7	2.69E-6	2.24E-7	1.15E-5	0.00E+0	2.80E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.80E-7	0.00E+0		
	10 ⁶	<i>trans</i>	6.41E-4	1.50E-6	0.00E+0	9.46E-5	2.17E-4	9.60E-6	2.64E-3	1.00E-7	5.07E-5	2.00E-7	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	7.00E-7	0.00E+0		
		<i>cis</i>	5.67E-5	1.00E-7	0.00E+0	2.59E-5	2.57E-4	3.80E-6	1.55E-3	1.00E-7	3.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0		
		<i>mix</i>	3.84E-4	8.85E-7	0.00E+0	6.44E-5	2.34E-4	7.05E-6	2.16E-3	1.00E-7	3.00E-5	1.12E-7	1.12E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.36E-7	0.00E+0		
	10 ⁷	<i>trans</i>	2.46E-4	9.00E-7	0.00E+0	8.41E-4	3.86E-4	8.37E-5	1.93E-2	5.00E-7	3.66E-4	6.00E-7	6.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.10E-6	1.00E-7		
		<i>cis</i>	2.31E-5	1.00E-7	0.00E+0	5.66E-4	1.57E-3	8.91E-5	7.04E-2	1.00E-7	2.68E-5	7.00E-7	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.00E-7	2.20E-6		
		<i>mix</i>	1.48E-4	5.48E-7	0.00E+0	7.20E-4	9.05E-4	8.61E-5	4.17E-2	3.24E-7	2.17E-4	6.44E-7	5.12E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.36E-7	1.02E-6		
	1200	533	<i>trans</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	5.55E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
10 ⁴		<i>trans</i>	2.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.49E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.55E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁵		<i>trans</i>	6.91E-5	2.00E-7	0.00E+0	1.00E-7	3.00E-7	0.00E+0	1.30E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0		
		<i>cis</i>	4.90E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	5.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>mix</i>	4.05E-5	1.11E-7	0.00E+0	5.55E-8	2.11E-7	0.00E+0	9.44E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.11E-7	0.00E+0		
10 ⁶		<i>trans</i>	5.19E-4	3.40E-6	0.00E+0	2.40E-5	5.51E-5	2.10E-6	2.97E-4	0.00E+0	9.70E-6	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.50E-6	0.00E+0		
		<i>cis</i>	5.41E-5	3.00E-7	0.00E+0	9.10E-6	4.71E-5	9.00E-7	1.71E-4	0.00E+0	7.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-7	0.00E+0		
		<i>mix</i>	3.12E-4	2.02E-6	0.00E+0	1.74E-5	5.15E-5	1.57E-6	2.41E-4	0.00E+0	5.69E-6	0.00E+0	5.55E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.56E-6	0.00E+0		
10 ⁷		<i>trans</i>	8.35E-4	7.10E-6	0.00E+0	1.02E-3	5.47E-4	8.81E-5	1.14E-2	7.00E-7	3.47E-4	1.40E-6	1.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	7.10E-6	4.00E-7		
		<i>cis</i>	1.07E-4	1.60E-6	0.00E+0	4.59E-4	9.97E-4	4.65E-5	1.60E-2	4.00E-7	3.59E-5	4.00E-7	7.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-6	7.00E-7		
		<i>mix</i>	5.10E-4	4.65E-6	0.00E+0	7.69E-4	7.48E-4	6.96E-5	1.34E-2	5.66E-7	2.08E-4	9.55E-7	1.20E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.38E-6	5.34E-7		

T (K)	P (Pa)	iso	i38	i39	i40	i41	i42	i45	<i>E</i> -βS	Z-βS	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p8	p10	
1000	533	<i>trans</i>	3.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.40E-6	2.53E-3	3.41E-2	7.35E-3	6.77E-1	1.39E-1	6.95E-2	2.20E-5	4.86E-3	6.64E-2	8.70E-6	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.20E-6	4.43E-3	4.07E-3	7.15E-4	8.79E-1	1.66E-2	6.10E-3	2.79E-5	7.68E-3	8.18E-2	1.67E-5	
		<i>mix</i>	1.68E-7	5.60E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.87E-6	3.36E-3	2.09E-2	4.43E-3	7.65E-1	8.49E-2	4.16E-2	2.46E-5	6.10E-3	7.31E-2	1.22E-5	
	10 ⁴	<i>trans</i>	1.16E-5	1.47E-5	0.00E+0	0.00E+0	5.30E-6	1.15E-3	2.54E-3	3.41E-2	6.72E-3	6.76E-1	1.38E-1	6.40E-2	1.87E-5	4.85E-3	6.48E-2	7.60E-6	
		<i>cis</i>	1.20E-6	2.90E-6	0.00E+0	0.00E+0	6.00E-7	1.21E-3	4.45E-3	4.07E-3	6.86E-4	8.79E-1	1.65E-2	5.85E-3	2.66E-5	7.64E-3	8.08E-2	1.29E-5	
		<i>mix</i>	7.03E-6	9.51E-6	0.00E+0	0.00E+0	3.23E-6	1.18E-3	3.38E-3	2.09E-2	4.07E-3	7.65E-1	8.46E-2	3.84E-2	2.22E-5	6.08E-3	7.18E-2	9.93E-6	
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.90E-5	7.94E-4	1.00E-7	1.00E-7	2.99E-4	1.02E-2	2.45E-3	3.31E-2	4.10E-3	6.71E-1	1.34E-1	4.04E-2	1.73E-5	4.66E-3	5.24E-2	7.20E-6	
		<i>cis</i>	3.50E-6	5.98E-4	2.00E-7	0.00E+0	2.15E-4	1.27E-2	4.43E-3	3.91E-3	4.80E-4	8.77E-1	1.60E-2	4.22E-3	2.35E-5	7.59E-3	6.94E-2	1.58E-5	
		<i>mix</i>	1.22E-5	7.08E-4	1.44E-7	5.60E-8	2.62E-4	1.13E-2	3.32E-3	2.03E-2	2.51E-3	7.62E-1	8.21E-2	2.45E-2	2.00E-5	5.95E-3	5.98E-2	1.10E-5	
	10 ⁶	<i>trans</i>	8.20E-6	4.66E-3	3.70E-6	3.50E-6	3.05E-3	1.53E-2	2.00E-3	2.71E-2	8.96E-4	5.64E-1	1.08E-1	9.65E-3	8.40E-6	3.45E-3	2.43E-2	5.20E-6	
		<i>cis</i>	2.10E-6	6.89E-3	6.20E-6	1.80E-6	4.04E-3	2.52E-2	4.30E-3	3.22E-3	1.24E-4	8.58E-1	1.28E-2	1.18E-3	1.60E-5	6.81E-3	4.16E-2	1.22E-5	
		<i>mix</i>	5.52E-6	5.64E-3	4.80E-6	2.75E-6	3.48E-3	1.96E-2	3.01E-3	1.66E-2	5.57E-4	6.93E-1	6.61E-2	5.93E-3	1.17E-5	4.93E-3	3.19E-2	8.28E-6	
	10 ⁷	<i>trans</i>	1.00E-7	8.51E-4	1.70E-6	9.88E-5	2.98E-3	4.18E-3	7.20E-4	1.03E-2	3.17E-5	1.52E-1	3.89E-2	5.19E-4	1.40E-6	1.01E-3	2.41E-3	1.40E-6	
		<i>cis</i>	2.00E-7	4.17E-3	9.40E-6	3.68E-4	1.39E-2	2.00E-2	3.59E-3	1.12E-3	4.20E-6	6.82E-1	4.16E-3	6.35E-5	3.40E-6	5.00E-3	1.16E-2	5.90E-6	
		<i>mix</i>	1.44E-7	2.31E-3	5.08E-6	2.17E-4	7.76E-3	1.11E-2	1.98E-3	6.29E-3	1.96E-5	3.85E-1	2.36E-2	3.19E-4	2.28E-6	2.77E-3	6.46E-3	3.38E-6	
	1200	533	<i>trans</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	8.93E-3	8.86E-2	9.73E-3	5.02E-1	2.34E-1	7.52E-2	9.44E-5	1.34E-2	6.82E-2	3.89E-5
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.03E-2	1.42E-2	1.49E-3	7.84E-1	4.15E-2	9.98E-3	1.39E-4	2.61E-2	1.02E-1	8.17E-5
			<i>mix</i>	5.55E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.55E-8	1.40E-2	5.54E-2	6.06E-3	6.28E-1	1.48E-1	4.61E-2	1.14E-4	1.90E-2	8.33E-2	5.80E-5
10 ⁴		<i>trans</i>	1.70E-6	1.20E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.88E-5	8.96E-3	8.85E-2	9.61E-3	5.03E-1	2.33E-1	7.49E-2	8.69E-5	1.34E-2	6.80E-2	3.77E-5	
		<i>cis</i>	2.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	9.73E-5	2.03E-2	1.42E-2	1.47E-3	7.84E-1	4.15E-2	9.96E-3	1.38E-4	2.60E-2	1.02E-1	8.44E-5	
		<i>mix</i>	1.03E-6	7.10E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	9.26E-5	1.40E-2	5.54E-2	5.98E-3	6.28E-1	1.48E-1	4.59E-2	1.09E-4	1.90E-2	8.31E-2	5.85E-5	
10 ⁵		<i>trans</i>	1.77E-5	8.38E-5	0.00E+0	1.00E-7	2.98E-5	3.21E-3	8.89E-3	8.80E-2	8.79E-3	5.04E-1	2.32E-1	6.88E-2	8.29E-5	1.33E-2	6.42E-2	3.62E-5	
		<i>cis</i>	4.80E-6	4.14E-5	0.00E+0	0.00E+0	1.38E-5	4.06E-3	2.03E-2	1.40E-2	1.37E-3	7.85E-1	4.11E-2	9.46E-3	1.25E-4	2.59E-2	9.80E-2	7.98E-5	
		<i>mix</i>	1.20E-5	6.49E-5	0.00E+0	5.55E-8	2.27E-5	3.59E-3	1.40E-2	5.50E-2	5.49E-3	6.29E-1	1.47E-1	4.23E-2	1.02E-4	1.89E-2	7.93E-2	5.56E-5	
10 ⁶		<i>trans</i>	2.33E-5	2.34E-3	1.40E-6	1.60E-6	1.11E-3	1.45E-2	8.39E-3	8.30E-2	4.80E-3	4.99E-1	2.19E-1	3.91E-2	7.40E-5	1.20E-2	4.57E-2	3.12E-5	
		<i>cis</i>	7.70E-6	2.63E-3	2.20E-6	5.00E-7	1.14E-3	2.26E-2	2.01E-2	1.33E-2	8.38E-4	7.84E-1	3.82E-2	5.92E-3	1.14E-4	2.49E-2	7.56E-2	7.83E-5	
		<i>mix</i>	1.64E-5	2.47E-3	1.76E-6	1.11E-6	1.12E-3	1.81E-2	1.36E-2	5.19E-2	3.04E-3	6.26E-1	1.38E-1	2.43E-2	9.17E-5	1.77E-2	5.90E-2	5.22E-5	
10 ⁷		<i>trans</i>	4.50E-6	3.21E-3	8.70E-6	1.03E-4	4.79E-3	1.11E-2	5.40E-3	5.60E-2	6.55E-4	2.98E-1	1.43E-1	6.40E-3	2.56E-5	6.54E-3	1.20E-2	1.53E-5	
		<i>cis</i>	2.90E-6	8.31E-3	2.65E-5	1.34E-4	1.08E-2	2.87E-2	1.83E-2	8.50E-3	1.35E-4	7.17E-1	2.31E-2	1.03E-3	4.99E-5	2.04E-2	3.20E-2	4.33E-5	
		<i>mix</i>	3.79E-6	5.48E-3	1.66E-5	1.17E-4	7.46E-3	1.89E-2	1.12E-2	3.49E-2	4.23E-4	4.85E-1	8.98E-2	4.01E-3	3.64E-5	1.27E-2	2.09E-2	2.78E-5	

T (K)	P (Pa)	iso	E-i1	Z-i1	E-i2	Z-i2	i4	i5	i6	i7	i8	i9	i10	i11	i12	i13	i14	E-i15			
1500	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.40E-6	0.00E+0	1.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	9.03E-7	0.00E+0	8.23E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁵	<i>trans</i>	7.00E-7	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	4.39E-5	0.00E+0	1.35E-4	7.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	3.00E-7	7.40E-6	0.00E+0	7.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	4.40E-6	0.00E+0	9.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	1.10E-6	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	3.84E-7	2.65E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.61E-5	0.00E+0	7.82E-5	3.84E-7	0.00E+0	0.00E+0	5.49E-8	0.00E+0	2.10E-7	4.56E-6	0.00E+0	4.74E-7	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁶	<i>trans</i>	1.43E-4	1.12E-4	6.00E-7	1.20E-6	5.82E-4	4.00E-7	4.16E-3	9.30E-6	4.00E-7	4.80E-6	8.29E-5	3.62E-5	5.20E-6	5.79E-4	0.00E+0	5.24E-5	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.38E-5	1.16E-5	0.00E+0	3.00E-7	8.48E-5	0.00E+0	5.41E-4	1.40E-6	1.00E-7	2.10E-6	6.77E-5	2.71E-5	1.06E-5	7.91E-5	0.00E+0	7.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	8.47E-5	6.69E-5	3.29E-7	7.94E-7	3.58E-4	2.19E-7	2.53E-3	5.73E-6	2.65E-7	3.58E-6	7.60E-5	3.21E-5	7.64E-6	3.53E-4	0.00E+0	3.22E-5	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁷	<i>trans</i>	1.90E-2	1.55E-2	3.86E-4	3.40E-4	1.68E-3	3.06E-5	3.31E-2	4.22E-5	4.91E-5	1.40E-3	7.28E-3	3.58E-3	2.45E-5	8.51E-3	0.00E+0	5.00E-4	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.83E-3	2.34E-3	6.53E-5	5.84E-5	4.64E-4	5.90E-6	5.57E-3	1.28E-5	1.43E-5	1.11E-3	9.49E-3	4.63E-3	6.00E-5	1.70E-3	0.00E+0	8.20E-5	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.17E-2	9.54E-3	2.41E-4	2.13E-4	1.13E-3	1.94E-5	2.07E-2	2.89E-5	3.34E-5	1.27E-3	8.28E-3	4.06E-3	4.05E-5	5.43E-3	0.00E+0	3.11E-4	0.00E+0	0.00E+0	
	1800	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
10 ⁴		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁵		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-7	0.00E+0	7.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.18E-7	0.00E+0	3.81E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁶		<i>trans</i>	2.40E-6	1.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	2.01E-5	0.00E+0	1.17E-4	8.00E-7	0.00E+0	3.00E-7	1.00E-6	5.00E-7	3.00E-7	1.15E-5	0.00E+0	1.50E-6	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.00E-7	5.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	4.40E-6	0.00E+0	1.53E-5	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	8.00E-7	8.00E-7	7.00E-7	1.10E-6	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.40E-6	1.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.29E-5	0.00E+0	7.05E-5	5.27E-7	0.00E+0	1.63E-7	9.09E-7	6.37E-7	4.82E-7	6.76E-6	0.00E+0	8.62E-7	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁷		<i>trans</i>	7.56E-4	6.35E-4	2.39E-5	2.32E-5	3.52E-4	1.60E-6	4.49E-3	1.25E-5	4.50E-6	5.21E-5	6.85E-4	3.37E-4	1.33E-5	1.02E-3	0.00E+0	7.86E-5	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.41E-4	1.20E-4	5.80E-6	5.30E-6	1.04E-4	6.00E-7	8.91E-4	4.30E-6	1.60E-6	4.22E-5	8.00E-4	4.07E-4	4.19E-5	2.47E-4	0.00E+0	1.52E-5	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	4.76E-4	4.00E-4	1.57E-5	1.50E-5	2.39E-4	1.14E-6	2.85E-3	8.77E-6	3.18E-6	4.76E-5	7.37E-4	3.69E-4	2.63E-5	6.66E-4	0.00E+0	4.97E-5	0.00E+0	0.00E+0	

T (K)	P (Pa)	iso	Z-i15	i16	i24	i25	i26	i27	i28	i29	i31	E-i32	Z-i32	i33	i34	i35	i36	i37			
1500	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁴	<i>trans</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	5.49E-8	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.60E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	9.23E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁶	<i>trans</i>	7.33E-5	6.00E-7	0.00E+0	9.00E-7	1.80E-6	1.00E-7	6.90E-6	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	7.80E-6	2.00E-7	0.00E+0	1.00E-6	1.20E-6	1.00E-7	5.10E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	4.37E-5	4.19E-7	0.00E+0	9.45E-7	1.53E-6	1.00E-7	6.09E-6	0.00E+0	1.10E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.19E-7	0.00E+0	0.00E+0	
	10 ⁷	<i>trans</i>	7.08E-4	1.46E-5	0.00E+0	2.75E-4	1.87E-4	2.05E-5	1.19E-3	4.00E-7	6.46E-5	1.10E-6	1.30E-6	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.25E-5	6.00E-7	0.00E+0	
		<i>cis</i>	1.19E-4	2.50E-6	0.00E+0	1.59E-4	2.44E-4	1.38E-5	9.87E-4	1.00E-7	9.30E-6	5.00E-7	5.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.80E-6	6.00E-7	0.00E+0	
		<i>mix</i>	4.42E-4	9.14E-6	0.00E+0	2.23E-4	2.13E-4	1.75E-5	1.10E-3	2.65E-7	3.96E-5	8.29E-7	9.39E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.12E-6	6.00E-7	0.00E+0	
	1800	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
			<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0
10 ⁴		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁵		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁶		<i>trans</i>	2.30E-6	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	3.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	1.43E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.54E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.54E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	
10 ⁷		<i>trans</i>	1.17E-4	3.60E-6	0.00E+0	2.39E-5	1.71E-5	1.80E-6	5.14E-5	0.00E+0	2.60E-6	1.00E-7	4.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.30E-6	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>cis</i>	2.31E-5	8.00E-7	0.00E+0	1.88E-5	1.68E-5	2.70E-6	5.16E-5	0.00E+0	7.00E-7	1.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	
		<i>mix</i>	7.40E-5	2.32E-6	0.00E+0	2.16E-5	1.70E-5	2.21E-6	5.15E-5	0.00E+0	1.73E-6	1.00E-7	2.18E-7	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.16E-6	0.00E+0	0.00E+0	

T (K)	P (Pa)	iso	i38	i39	i40	i41	i42	i45	<i>E</i> -βS	<i>Z</i> -βS	p1	p2	p3	p4	p5	p6	p8	p10		
1500	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.57E-2	2.04E-1	1.05E-2	2.65E-1	3.45E-1	6.74E-2	4.04E-4	3.05E-2	5.24E-2	1.36E-4		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.83E-2	4.03E-2	2.59E-3	5.80E-1	8.61E-2	1.32E-2	6.09E-4	8.23E-2	1.06E-1	4.19E-4	
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	5.39E-2	1.30E-1	6.92E-3	4.07E-1	2.28E-1	4.29E-2	4.97E-4	5.39E-2	7.67E-2	2.64E-4	
	10 ⁴	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	8.00E-7	2.57E-2	2.03E-1	1.05E-2	2.65E-1	3.45E-1	6.73E-2	3.93E-4	3.05E-2	5.24E-2	1.40E-4		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	6.00E-7	8.83E-2	4.03E-2	2.61E-3	5.80E-1	8.60E-2	1.33E-2	6.20E-4	8.24E-2	1.06E-1	4.11E-4		
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	7.10E-7	5.40E-2	1.30E-1	6.95E-3	4.07E-1	2.28E-1	4.29E-2	4.95E-4	5.39E-2	7.67E-2	2.62E-4		
	10 ⁵	<i>trans</i>	1.60E-6	1.20E-6	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	1.42E-4	2.57E-2	2.03E-1	1.05E-2	2.65E-1	3.45E-1	6.70E-2	3.94E-4	3.04E-2	5.22E-2	1.35E-4		
		<i>cis</i>	4.00E-7	2.00E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	1.79E-4	8.81E-2	4.03E-2	2.59E-3	5.80E-1	8.58E-2	1.32E-2	6.28E-4	8.24E-2	1.06E-1	4.20E-4		
		<i>mix</i>	1.06E-6	7.49E-7	0.00E+0	0.00E+0	2.00E-7	1.59E-4	5.39E-2	1.30E-1	6.91E-3	4.08E-1	2.28E-1	4.27E-2	5.00E-4	5.39E-2	7.66E-2	2.64E-4		
	10 ⁶	<i>trans</i>	1.93E-5	1.51E-4	1.00E-7	2.00E-7	5.57E-5	3.63E-3	2.54E-2	2.02E-1	9.83E-3	2.69E-1	3.42E-1	6.34E-2	3.84E-4	2.99E-2	4.86E-2	1.31E-4		
		<i>cis</i>	1.04E-5	1.34E-4	1.00E-7	2.00E-7	5.23E-5	6.11E-3	8.78E-2	3.99E-2	2.46E-3	5.82E-1	8.47E-2	1.27E-2	5.99E-4	8.17E-2	1.00E-1	4.05E-4		
		<i>mix</i>	1.53E-5	1.43E-4	1.00E-7	2.00E-7	5.42E-5	4.75E-3	5.36E-2	1.29E-1	6.50E-3	4.10E-1	2.26E-1	4.05E-2	4.81E-4	5.32E-2	7.19E-2	2.55E-4		
	10 ⁷	<i>trans</i>	2.61E-5	2.57E-3	9.10E-6	3.29E-5	1.79E-3	1.18E-2	2.31E-2	1.89E-1	5.39E-3	2.62E-1	3.18E-1	3.66E-2	3.06E-4	2.57E-2	3.04E-2	1.05E-4		
		<i>cis</i>	1.84E-5	4.51E-3	2.32E-5	2.07E-5	2.76E-3	2.60E-2	8.56E-2	3.64E-2	1.51E-3	5.83E-1	7.53E-2	7.72E-3	4.75E-4	7.69E-2	6.92E-2	3.32E-4		
		<i>mix</i>	2.26E-5	3.45E-3	1.55E-5	2.74E-5	2.23E-3	1.82E-2	5.13E-2	1.20E-1	3.64E-3	4.07E-1	2.09E-1	2.36E-2	3.82E-4	4.88E-2	4.79E-2	2.08E-4		
	1800	533	<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-2	3.15E-1	9.44E-3	1.18E-1	3.91E-1	5.29E-2	9.76E-4	4.14E-2	3.14E-2	2.46E-4	
			<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.05E-1	6.26E-2	3.40E-3	3.70E-1	1.08E-1	1.29E-2	1.42E-3	1.52E-1	8.43E-2	1.03E-3
			<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.15E-1	2.00E-1	6.69E-3	2.33E-1	2.62E-1	3.47E-2	1.18E-3	9.16E-2	5.55E-2	6.02E-4
10 ⁴		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	4.00E-2	3.15E-1	9.43E-3	1.18E-1	3.91E-1	5.31E-2	9.69E-4	4.13E-2	3.14E-2	2.49E-4		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.05E-1	6.26E-2	3.38E-3	3.70E-1	1.08E-1	1.29E-2	1.40E-3	1.52E-1	8.44E-2	1.04E-3		
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.15E-1	2.00E-1	6.67E-3	2.33E-1	2.62E-1	3.48E-2	1.17E-3	9.16E-2	5.55E-2	6.08E-4		
10 ⁵		<i>trans</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	1.90E-6	4.00E-2	3.15E-1	9.40E-3	1.18E-1	3.90E-1	5.30E-2	9.99E-4	4.15E-2	3.14E-2	2.53E-4		
		<i>cis</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	3.10E-6	2.05E-1	6.26E-2	3.39E-3	3.70E-1	1.08E-1	1.29E-2	1.43E-3	1.51E-1	8.42E-2	1.00E-3		
		<i>mix</i>	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	0.00E+0	2.45E-6	1.15E-1	2.00E-1	6.66E-3	2.33E-1	2.62E-1	3.47E-2	1.20E-3	9.16E-2	5.55E-2	5.94E-4		
10 ⁶		<i>trans</i>	2.70E-6	2.80E-6	0.00E+0	1.00E-7	1.20E-6	2.34E-4	3.99E-2	3.15E-1	9.40E-3	1.19E-1	3.90E-1	5.28E-2	9.66E-4	4.13E-2	3.12E-2	2.46E-4		
		<i>cis</i>	1.10E-6	2.00E-6	0.00E+0	0.00E+0	1.40E-6	4.29E-4	2.05E-1	6.25E-2	3.36E-3	3.71E-1	1.08E-1	1.28E-2	1.43E-3	1.51E-1	8.39E-2	1.02E-3		
		<i>mix</i>	1.97E-6	2.44E-6	0.00E+0	5.45E-8	1.29E-6	3.23E-4	1.15E-1	2.00E-1	6.65E-3	2.33E-1	2.62E-1	3.46E-2	1.18E-3	9.15E-2	5.52E-2	5.99E-4		
10 ⁷		<i>trans</i>	2.33E-5	3.13E-4	2.40E-6	4.90E-6	1.66E-4	3.67E-3	3.93E-2	3.12E-1	8.65E-3	1.23E-1	3.87E-1	4.92E-2	9.24E-4	4.01E-2	2.76E-2	2.27E-4		
		<i>cis</i>	1.91E-5	5.08E-4	3.70E-6	3.10E-6	2.53E-4	9.07E-3	2.03E-1	6.12E-2	3.14E-3	3.76E-1	1.06E-1	1.21E-2	1.34E-3	1.49E-1	7.50E-2	9.54E-4		
		<i>mix</i>	2.14E-5	4.02E-4	2.99E-6	4.08E-6	2.06E-4	6.13E-3	1.14E-1	1.98E-1	6.14E-3	2.38E-1	2.59E-1	3.23E-2	1.11E-3	8.99E-2	4.92E-2	5.58E-4		