

ПРИЛОЖЕНИЕ А

БАЗА ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ

Соединения сгруппированы по числу атомов углерода. В пределах каждой группы выделяются подгруппы по числу атомов водорода, внутри которых соединения перечислены в алфавитном порядке названий дополнительных атомов. В списке приведены наиболее употребительные названия веществ. В названии разрешен только 21 символ. Полные наименования веществ и их наиболее употребительные синонимы представлены в Словаре соединений (см. приложение В). Большинство значений констант, содержащихся в базе данных, заимствовано из собраний экспериментальных данных, а остальные рассчитаны методами, описанными в данной книге.

- MM — молекулярная масса
- TFP — нормальная температура плавления, К
- TB — нормальная температура кипения, К
- TC — критическая температура, К
- PC — критическое давление, атм
- VC — критический объем, см³/моль
- ZC — критический коэффициент сжимаемости
- OMEGA — фактор ацентричности Питцера
- LIQDEN — плотность жидкости при температуре TDEN, г/см³
- TDEN — опорное значение температуры для LIQDEN, К
- DIPM — дипольный момент, дебай
- CPVAR A, CPVAR B, CPVAR C, CPVAR D — константы в уравнении идеально-газовой теплоемкости, в котором CP выражена в кал/(моль · К), а T — в кельвинах
- CP = CPVAR A + (CPVAR B) * T +
+ (CPVAR C) * T ** 2 +
+ (CPVAR D) * T ** 3
- VISB, VISTO — константы в уравнении вязкости жидкости, в котором вязкость выражена в сантипуазах, а T — в кельвинах: LG (вязкости) = (VISB) * ((1/T) - (1/VISTO))
- DELHG — стандартная теплота образования при 298 К, ккал/моль
- DELGF — стандартная энергия образования Гиббса при 298 К для идеального газа при 1 атм, ккал/моль
- ANTA, ANTB, ANTC — коэффициенты уравнения Антуана для давления паров, в котором давление выражено в мм рт. ст., а T — в кельвинах LN (давление паров) = ANTA - ANTB/(T + ANTC)
- TMX — верхний предел применимости уравнения Антуана по температуре, К
- TMN — нижний предел применимости уравнения Антуана по температуре, К
- HARA, HARB, HARC, HARD — коэффициенты уравнения Гарлахера для давления паров, в котором давление паров выражено в мм рт. ст., T в кельвинах LN (PVP) = HARA + HARB/T + HARC * LN (T) + HARD * PVP/T ** 2 где PVP — давление паров
- HV — теплота парообразования при нормальной температуре кипения, кал/моль

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
1	AR	АРГОН	15,2330	700,51	—5,84	94	81	31,173	—1039,64	—2,932	0,264	1360
2	BCL3	БОРА ТРИХЛОРИД	—	—	—	—	—	52,723	—4443,16	—5,404	2,97	—
3	BF3	БОРА ТРИФТОРИД	—	—	—	—	—	67,758	—3481,19	—7,963	0,768	—
4	BR2	БРОМ	15,8441	2562,32	—51,56	354	259	—	—	—	—	7210,
5	CLNO	НИТРОЗИЛХЛОРИД	16,9505	2520,70	—23,46	285	210	36,380	—3748,59	—2,819	1,20	6140,
6	CL2	ХЛОР	15,9610	1978,32	—27,01	264	172	42,217	—3412,28	—3,894	1,27	4880,
7	CL3P	ФОСФОРА ТРИХЛОРИД	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
8	CL4SI	КРЕМНИЯ ТЕТРАХЛОРИД	15,8019	2634,16	—43,15	364	238	—	—	—	—	6580,
9	D2	ДЕЙТЕРИЙ	13,2954	157,89	0,00	25	19	—	—	—	—	292,
10	D2O	ДЕЙТЕРИЙ ОКСИД	—	—	—	—	—	—	—	—	—	9880,
11	F2	ФТОР	15,6700	714,10	—6,00	91	59	30,772	—1040,27	—2,683	0,210	1560,
12	F3N	АЗОТА ТРИФТОРИД	15,6107	1155,69	—15,37	155	103	39,219	—1970,37	—3,81	0,679	—
13	F4SI	КРЕМНИЯ ТЕТРАФТОРИД	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
14	F6S	СЕРЫ ГЕКСАФТОРИД	19,3785	2524,78	—11,16	220	159	—	—	—	—	—
15	HBR	ВОДОРОДА БРОМИД	14,4687	1242,53	—47,86	221	184	28,102	—2394,35	—1,843	0,871	4220,
16	HCL	ВОДОРОДА ХЛОРИД	16,5040	1714,25	—14,45	200	137	38,614	—2626,67	—3,443	0,717	3860,
17	HF	ВОДОРОДА ФТОРИД	17,6958	3404,49	15,06	313	206	26,160	—3496,52	—1,338	1,84	1600,
18	HI	ВОДОРОДА ИОДИД	12,9149	957,96	—85,06	256	215	33,884	—3013,08	—2,673	1,23	4724,
19	H2	ВОДОРОД	13,6333	164,90	3,19	25	14	12,050	—114,95	0,045	0,048	216,
20	H2O	ВОДА	18,3036	3816,44	—46,13	441	284	55,336	—6869,50	—5,115	1,05	9717,
21	H2S	ВОДОРОДА СУЛЬФИД	16,1040	1768,69	—26,06	230	190	42,687	—3132,31	—3,985	0,871	4460,
22	H3N	АММИАК	16,9481	2132,50	—32,98	261	179	51,947	—4104,67	—5,146	0,820	5580,
23	H4N2	ГИДРАЗИН	17,9899	3877,65	—45,15	343	288	56,096	—6951,84	—5,286	1,63	10700,
24	HE(4)	ГЕЛИЙ	12,2514	33,7329	1,79	4,3	3,7	8,622	—12,23	0,433	0,007	22,
25	I2	ИОД	16,1597	3709,23	—68,16	487	383	—	—	—	—	10000,
26	KR	КРИПТОН	15,2677	958,75	—8,71	129	113	30,717	—1408,77	—2,579	0,448	2309,
27	NO	АЗОТА ОКСИД	20,1314	1572,52	—4,88	140	95	61,514	—2465,78	—7,211	0,279	3300,
28	NO2	АЗОТА ДИОКСИД	20,5324	4141,29	3,65	320	230	61,862	—6073,34	—6,094	1,04	4555,
29	N2	АЗОТ	14,9542	588,72	—6,60	90	54	31,927	—924,86	—3,075	0,264	1333,
30	N2O	АЗОТА ЗАКИСЬ	16,1271	1506,49	—25,99	200	144	46,444	—2867,98	—4,655	0,743	3955,
31	NE	НЕОН	14,0099	180,47	—2,61	29	24	26,181	—295,44	—2,645	0,041	440,
32	O2	КИСЛОРОД	15,4075	734,55	—6,45	100	63	31,041	—1082,52	—2,761	0,265	1630,
33	O2S	СЕРЫ ДИОКСИД	16,7680	2302,35	—35,97	280	195	55,502	—4552,50	—5,666	1,32	5955,
34	O3	ОЗОН	15,7427	1272,18	—22,16	174	109	—	—	—	—	2670,
35	O3S	СЕРЫ ТРИОКСИД	20,8403	3995,70	—36,66	332	290	139,56	—10420,1	—17,38	1,60	9716,
36	XE	КСЕНОН	15,2958	1303,92	—14,50]	178	158	31,429	—1951,76	—2,544	0,804	3108,
37	CBRF3	ТРИФТОРБРОММЕТАН	—	—	—	—	—	44,255	—2769,96	—4,415	1,30	3706,
38	CCLF3	ХЛОРТРИФТОРМЕТАН	—	—	—	—	—	—	—	—	—	4772,
39	CCL2F2	ДИХЛОРДИФТОРМЕТАН	—	—	—	—	—	—	—	—	—	5830,
40	CCL2O	ФОСГЕН	15,7565	2167,31	—43,15	341	213	—	—	—	—	—

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
41	CCL3F	ТРИХЛОРФОРМЕТАН	15,8516	2401,61	-36,3	300	240	48,709	-4464,14	-4,753	2,85	5920,
42	CCl4	УГЛЕРОДА ТЕТРАХЛОРИД	15,8742	2808,19	-45,99	374	253	51,009	-5386,51	-4,953	3,82	7170,
43	CF4	УГЛЕРОДА ТЕТРАХЛОРИД	16,0543	1244,55	-13,06	148	93					2860,
44	CO	УГЛЕРОДА МОНООКСИД	14,3686	530,22	-13,15	108	63	32,981	-997,18	-3,216	0,284	1444,
45	COS	КАРБОНИЛСУЛЬФИД						41,853	-3137,78	-3,914	1,30	
46	CO2	УГЛЕРОДА ДИОКСИД	22,5898	3103,39	-0,16	204	154	52,703	-3146,64	-5,572	0,705	4100,
47	CS2	УГЛЕРОДА ДИСУЛЬФИД	15,9844	2690,85	-31,62	342	228	37,401	-4255,99	-3,027	2,21	6390,
48	CHCLF2	ХЛОРДИФОРМЕТАН	15,5602	1704,80	-41,3	240	225	52,663	-3768,03	-5,474	1,55	4826,
49	CHCL2F	ДИХЛОРОМОНОФОРМЕТАН						54,563	-4629,02	-5,59	2,22	5960,
50	CHCL3	ХЛОРОФОРМ	15,9732	2696,79	-46,16	370	260	52,872	-5359,56	-5,2	2,96	7100,
51	CHN	ВОДОРОДА ЦИАНИД	16,5138	2585,80	-37,15	330	234	37,742	-4183,37	-3,004	2,18	6027
52	CH2BR2	ДИБРОММЕТАН										
53	CH2CL2	ДИХЛОРМЕТАН	16,3029	2622,44	-41,70	332	229	53,767	-5110,2	-5,364	2,41	6690,
54	CH2O	ФОРМАЛЬДЕГИД	16,4775	2204,13	-30,15	271	185	45,118	-3873,26	-4,2	3,41	5500,
55	CH2O2	МУРАВЬИНАЯ КИСЛОТА	16,9882	3599,58	-26,09	409	271					5240,
56	CH3BR	МЕТИЛБРОМИД	16,0252	2271,71	-34,83	326	215	55,295	-4467,46	-5,788	2,35	5715,
57	CH3CL	МЕТИЛХЛОРИД	16,1052	2077,97	-29,55	266	180	43,660	-3642,21	-4,064	1,46	5120,
58	CH3F	МЕТИЛФТОРИД	16,3428	1704,41	-19,27	209	141	43,063	-2890,54	-4,102	0,906	
59	CH3I	МЕТИЛИОДИД	16,0905	2639,55	-36,5	325	260	47,781	-4686,90	-4,577	2,84	6500,
60	CH3NO2	НИТРОМЕТАН	16,2193	2972,64	-64,15	409	278	50,133	-5996,30	-4,641	3,08	8225,
61	CH4	МЕТАН	15,2243	897,84	-7,16	120	93	30,715	-1300,61	-2,641	0,442	1955,
62	CH4O	МЕТАНОЛ	18,5875	3626,55	-34,29	364	257	72,268	-7064,20	-7,68	1,86	8426,
63	CH4S	МЕТИЛМЕРКАПТАН	16,1909	2338,38	-34,44	300	200	46,610	-4233,88	-4,408	1,71	5870,
64	CH5N	МЕТИЛАМИН	17,2622	2484,83	-32,92	311	212	62,306	-4954,32	-6,642	1,40	6210,
65	CH6N2	МЕТИЛГИДРАЗИН	15,1424	2319,84	-91,7	400	270					
66	C2CLF5	ХЛОРПЕНТАФТОРЭТАН	15,7343	1848,90	-30,88	230	175	51,878	-3659,53	-5,433	2,25	4650,
67	C2CL2F4	1,1-ДИХЛОР-1,2,2,2-Te										
68	C2CL2F4	1,2-ДИХЛОР-1,1,2,2-Te										
69	C2CL3F3	1,2,2-ТРИХЛОР-1,1,2-Т	15,8424	2532,61	-45,67	360	250	52,316	-4327,01	-5,35	3,02	5560,
70	C2CL4	ТЕТРАХЛОРЭТИЛЕН	16,1642	3259,29	-52,15	460	307	57,097	-5249,75	-5,913	3,91	6570,
71	C2CL4F2	1,1,2,2-Тетрахлор-1,2-										
72	C2F4	ПЕРФТОРЭТЕН	15,8800	1574,60	-27,22	210	140	75,315	-7113,72	-8,344	4,95	
73	C2F6	ПЕРФТОРЭТАН	15,6422	1512,94	-26,94	200	170	51,903	-3165,74	-5,537	1,34	
74	C2N2	ДИЦИАН						48,373	-2969,90	-5,032	1,53	3860,
75	C2HCL3	ТРИХЛОРЭТИЛЕН	16,1827	3028,13	-43,15	400	260	58,323	-4390,8	-6,185	1,51	
76	C2HF3O2	ТРИФТОРУКСУСНАЯ КИ- СЛОТА						53,842	-5776,65	-5,295	3,70	7500,
77	C2H2	АЦЕТИЛЕН	16,3481	1637,14	-19,77	202	194	46,122	-2891,04	-4,612	0,863	4050,
78	C2H2F2	1,1-ДИФТОРЭТИЛЕН										
79	C2H2O	КЕТЕН	16,0197	1849,21	-35,15	255	170					4930,
80	C2H3CL	ВИНИЛХЛОРИД	14,9601	1803,84	-43,15	290	185	48,672	-3955,89	-4,823	1,85	5321,

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
81	C2H3CLF	1-ХЛОР-1,1-ДИФТОР-ЭТАН										
82	C2H3CLO	АЦЕТИЛХЛОРИД	15,7514	2447,33	-55,53	355	237					6850
83	C2H3CL3	1,1,2-ТРИХЛОРЕТАН	16,0381	3110,79	-56,16	428	302					7960,
84	C2H3F	ВИНИЛФТОРИД										
85	C2H3F3	1,1,1-ТРИФТОРЕТАН	15,8965	1814,91	-29,92	300	270	50,589	-3540,17	-5,223	1,79	4580,
86	C2H3N	АЦЕТОНИТРИЛ	16,2874	2945,47	-49,15	390	260	47,394	-5392,43	-4,357	3,49	7500
87	C2H3NO	МЕТИЛИЗОЦИАНАТ	16,3258	2480,37	-56,31	340	230					7070
88	C2H4	ЭТИЛЕН	15,5368	1347,01	-18,15	182	120	38,961	-2282,37	-3,678	0,881	3237
89	C2H4CL2	1,1-Дихлорэтан	16,0842	2697,29	-45,03	352	242	56,233	-5422,68	-5,726	3,17	6860
90	C2H4CL2	1,2-ДИХЛОРЕТАН	16,1764	2927,17	-50,22	373	240	51,956	-5712,66	-4,991	3,30	7650
91	C2H4F2	1,1-ДИФТОРЕТАН	16,1871	2095,35	-29,16	273	238	48,591	-3837,61	-4,811	1,87	5100
92	C2H4O	АЦЕТАЛЬДЕГИД	16,2481	2465,15	-37,15	320	210					6150
93	C2H4O	ЭТИЛЕНА ОКСИД	16,7400	2567,61	-29,01	310	200					6120
94	C2H4O2	УКСУСНАЯ КИСЛОТА	16,8080	3405,57	-56,34	430	290	57,834	-6841,98	-5,647	3,44	5660
95	C2H4O2	МЕТИЛФОРМИАТ	16,5104	2590,87	-42,60	324	225	57,840	-5258,90	-5,939	2,23	6740
96	C2H5BR	ЭТИЛБРОМИД	15,9338	2511,68	-41,44	333	226	37,985	-4246,27	-3,09	2,29	6330
97	C2H5CL	ЭТИЛХЛОРИД	15,9800	2332,01	-36,48	310	200	48,665	-4364,03	-4,733	2,26	5900
98	C2H5F	ЭТИЛФТОРИД	16,0686	1966,89	-27,00	252	170					7660
99	C2H5N	ЭТИЛЕНИМИН	16,4227	2610,44	-63,15	359	248					3515,
100	C2H6	ЭТАН	15,6637	1511,42	-17,16	199	130	38,759	-2464,42	-3,601	1,073	
101	C2H6O	ДИМЕТИЛОВЫЙ ЭФИР	16,8467	2361,44	-17,10	265	179	48,857	-3840,19	-4,856	1,71	5140,
102	C2H6O	ЭТАНОЛ	18,9119	3803,98	-41,68	369	270	83,319	-7994,90	-9,201	2,35	9260,
103	C2H6O2	ЭТИЛЕНГЛИКОЛЬ	20,2501	6022,18	-28,25	494	364					12550
104	C2H6S	ЭТИЛМЕРКАПТАН	16,0077	2497,23	-41,77	330	224	51,954	-4900,34	-5,139	2,55	6400,
105	C2H6S	ДИМЕТИЛСУЛЬФИД	16,0001	2511,56	-42,35	331	226					6440,
106	C2H7N	ЭТИЛАМИН	17,0073	2618,73	-37,30	316	215	64,056	-5352,01	-6,875	2,08	6700,
107	C2H7N	ДИМЕТИЛАМИН	16,2653	2358,77	-35,15	310	218	67,611	-5350,44	-7,435	2,03	6330,
108	C2H7NO	МОНОЭТАНОЛАМИН	17,8174	3988,33	-86,93	477	344					12000,
109	C2H8N2	ЭТИЛЕНДИАМИН	16,4082	3108,49	-72,15	425	292					10000,
110	C3H3N	АКРИЛОНИТРИЛ	15,9253	2782,21	-51,15	385	255					7800,
111	C3H4	ПРОПАДИЕН	13,1563	1054,72	-77,08	257	174					4450,
112	C3H4	МЕТИЛАЦЕТИЛЕН	15,6227	1850,66	-44,07	267	183					5290,
113	C3H4O	АКРОЛЕИН	15,9057	2606,53	-45,15	360	235					6770,
114	C3H4O2	АКРИЛОВАЯ КИСЛОТА	16,5617	3319,18	-80,15	450	315					11000,
115	C3H4O2	ВИНИЛФОРМИАТ	16,6531	2569,68	-63,15	350	240					7680,
116	C3H5CL	АЛЛИЛХЛОРИД	15,9772	2531,92	-47,15	350	230					6475,
117	C3H5CL3	1,2,3-ТРИХЛОРПРОПАН	16,1246	3417,27	-69,15	470	315					9180,
118	C3H5N	ПРОПИОНИТРИЛ	15,9571	2940,86	-55,15	405	270	53,398	-5937,37	-5,2	4,28	7710,
119	C3H6	ЦИКЛОПРОПАН	15,8599	1971,04	-26,65	245	180					4790,
120	C3H6	ПРОПИЛЕН	15,7027	1807,53	-26,15	240	160	44,794	-3260,31	-4,379	1,63	4400,

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
121	C3H6CL2	1,2-ДИХЛОРПРОПАН	16,0385	2985,07	—52,16	408	288					
122	C3H6O	АЦЕТОН	16,6513	2940,46	—35,93	350	241					7500,
123	C3H6O	АЛЛИЛОВЫЙ СПИРТ	16,9066	2928,20	—85,15	400	286					6960,
124	C3H6O	ПРОПИОНАЛЬ	16,2315	2659,02	—44,15	350	235					9550,
125	C3H6O	ПРОПИЛЕНА ОКСИД	15,3227	2107,58	—64,87	340	225					6760,
126	C3H6O	ВИНИЛМЕТИЛОВЫЙ ЭФИР	14,4602	1980,22	—25,15	315	190					6450,
127	C3H6O2	ПРОПИОНОВАЯ КИСЛОТА	17,3789	3723,42	—67,48	450	315	76,490	—8619,48	—8,139	3,93	7700,
128	C3H6O2	ЭТИЛФОРМИАТ	16,1611	2603,30	—54,15	360	240	60,604	—5724,26	—6,305	3,07	7200,
129	C3H6O2	МЕТИЛАЦЕТАТ	16,1295	2601,92	—56,15	360	245	61,268	—5840,56	—6,374	3,08	7200,
130	C3H7CL	ПРОПИЛХЛОРИД	15,9594	2581,48	—42,95	350	230					7200,
131	C3H7CL	ИЗОПРОПИЛХЛОРИД	16,0384	2490,48	—43,15	340	225					6510,
132	C3H8	ПРОПАН	15,7260	1872,46	—25,16	249	164	43,492	—3266,92	—4,179	1,81	6280,
133	C3H8O	1-ПРОПАНОЛ	17,5439	3166,38	—80,15	400	285	101,82	—9416,25	—11,79	3,13	4487,
134	C3H8O	ИЗОПРОПИЛОВЫЙ СПИРТ	18,6929	3640,20	—53,54	374	273					9980,
135	C3H8O	МЕТИЛЭТИЛОВЫЙ ЭФИР	13,5435	1161,63	—112,4	310	205	74,838	—5631,77	—8,549	2,45	5900,
136	C3H8O2	МЕТИЛАЛЬ	15,8237	2415,92	—52,58	315	270					
137	C3H8O2	1,2-ПРОПАДИОЛ	20,5324	6091,95	—22,46	483	357					12940,
138	C3H8O2	1,3-ПРОПАДИОЛ	17,2917	3888,84	—123,2	525	380					13500,
139	C3H8O3	ГЛИЦЕРИН	17,2392	4487,04	—140,2	600	440					14600,
140	C3H8S	МЕТИЛЭТИЛСУЛЬФИД	15,9765	2722,95	—48,37	360	250					7050,
141	C3H9N	Н-ПРОПИЛАМИН	15,9957	2551,72	—49,15	350	235					7100,
142	C3H9N	ИЗОПРОПИЛАМИН	16,3637	2582,35	—40,15	337	239					6500,
143	C3H9N	ТРИМЕТИЛАМИН	16,0499	2230,51	—39,15	305	215	50,869	—4261,51	—5,127	2,59	5760,
144	C4H2O3	МАЛЕИНОВЫЙ АНГИДРИД	16,2747	3765,65	—82,15	516	352					
145	C4H4	ВИНИЛАЦЕТИЛЕН	16,0100	2203,57	—43,15	305	200					
146	C4H4O	ФУРАН	16,0612	2442,70	—45,41	363	238					5850,
147	C4H4S	ТИОФЕН	16,0243	2869,07	—51,80	380	260					6474,
148	C4H5N	АЛЛИЛЦИАНИД	16,0019	3128,75	—58,15	430	400					7520,
149	C4H5N	ПИРРОЛ	16,7966	3457,47	—62,73	440	330					8200,
150	C4H6	1-БУТИН	16,0605	2271,42	—40,30	300	200					
151	C4H6	2-БУТИН	16,2871	2536,78	—37,34	320	240					5970,
152	C4H6	1,2-БУТАДИЕН	16,1039	2397,26	—30,88	305	245					6370,
153	C4H6	1,3-БУТАДИЕН	15,7727	2142,66	—34,30	290	215					5800,
154	C4H6O2	ВИНИЛАЦЕТАТ	16,1003	2744,68	—56,15	379	255					5370,
155	C4H6O3	АЦЕТАНГИДРИД	16,3982	3287,56	—75,11	437	308					
156	C4H6O4	ДИМЕТИЛОКСАЛАТ										9850,
157	C4H6O4	СУКЦИНОВАЯ КИСЛОТА										
158	C4H7N	БУТИРОНИТРИЛ	16,2092	3202,21	—56,16	433	307	56,605	—6476,68	—5,599	5,03	8220,
159	C4H7O2	МЕТИЛАКРИЛАТ	16,1088	2788,43	—59,15	390	260					7650,
160	C4H8	1-БУТЕН	15,7564	2132,42	—33,15	295	190	48,333	—3996,80	—4,788	2,46	5238,

NO	ФОР- МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
161	C4H8	ЦИС-2-БУТЕН	15,8171	2210,71	-36,15	305	200	49,609	-4217,05	-4,938	2,58	5580,
162	C4H8	ТРАНС-2-БУТЕН	15,8171	2212,32	-33,15	300	200	50,137	-4174,56	-5,041	2,66	5439,
163	C4H8	ЦИКЛОБУТАН	15,9254	2359,09	-31,78	290	200					5780,
164	C4H8	ИЗОБУТИЛЕН	15,7528	2125,75	-33,15	290	190	50,832	-4104,56	-5,157	2,46	5286,
165	C4H8O	н-МАСЛЯНЫЙ АЛЬДЕ- ГИД	16,1668	2839,09	-50,15	380	255					7530,
166	C4H8O	ИЗОМАСЛЯНЫЙ АЛЬ- ДЕГИД	15,9888	2676,98	-51,15	370	247					7500,
167	C4H8O	МЕТИЛЭТИЛКЕТОН	16,5986	3150,42	-36,65	376	257	47,683	-5328,22	-4,426	3,88	7460,
168	C4H8O	ТЕТРАГИДРОФУРАН	16,1069	2768,38	-46,90	370	270					7070,
169	C4H8O	ВИНИЛЭТИЛОВЫЙ ЭФИР	15,8911	2449,26	-44,15	340	225					6330,
170	C4H8O2	н-МАСЛЯНАЯ КИСЛОТА	17,9240	4130,93	-70,55	470	335	73,806	-9015,33	-7,651	4,22	10040,
171	C4H8O2	1,4-ДИОКСАН	16,1327	2966,88	-62,15	410	275					8690,
172	C4H8O2	ЭТИЛАЦЕТАТ	16,1516	2790,50	-57,15	385	260	65,669	-6394,77	-6,965	4,01	7700,
173	C4H8O2	ИЗОМАСЛЯНАЯ КИС- СЛОТА	16,7792	3385,49	-94,15	465	330	82,657	-9222,72	-8,986	5,15	9830,
174	C4H8O2	МЕТИЛПРОПИОНАТ	16,1693	2804,06	-58,92	385	260	65,367	-6419,79	-6,915	3,98	7780
175	C4H8O2	н-ПРОПИЛФОРМИАТ	15,7671	2593,95	-69,69	360	280	63,318	-6292,56	-6,635	4,01	7760,
176	C4H9CL	1-ХЛОРБУТАН	15,9750	2826,26	-49,05	385	255					7170,
177	C4H9CL	2-ХЛОРБУТАН	15,9907	2753,43	-47,15	375	250					6980,
178	C4H9CL	ТРЕТ-БУТИЛХЛОРИД	15,8121	2567,15	-44,15	360	235					6550,
179	C4H9N	ПИРРОЛИДИН	15,9444	2717,03	-67,90	400	300					
180	C4H9NO	МОРФОЛИН	16,2364	3171,35	-71,15	440	300					9000,
181	C4H10	н-БУТАН	15,6782	2154,90	-34,42	290	195	48,334	-4065,57	-4,781	2,68	5352,
182	C4H10	ИЗОБУТАН	15,5381	2032,73	-33,15	280	187	46,141	-3771,21	-4,509	2,57	5090,
183	C4H10O	н-БУТАНОЛ	17,2160	3137,02	-94,43	404	288					10300,
184	C4H10O	2-БУТАНОЛ	17,2102	3026,03	-86,65	393	298					9750,
185	C4H10O	ИЗОБУТАНОЛ	16,8712	2874,73	-100,3	388	293					10050,
186	C4H10O	ТРЕТ-БУТАНОЛ	16,8548	2658,29	-95,50	376	293					9330,
187	C4H10O	ДИЭТИЛОВЫЙ ЭФИР	16,0828	2511,29	-41,94	340	225	57,260	-5105,90	-5,945	3,40	6380,
188	C4H10O2	1,2-ДИМЕТОКСИЭТАН	16,0241	2869,79	-53,15	393	262					7510,
189	C4H10O3	ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЬ	17,0326	4122,52	-122,5	560	402					13670,
190	C4H10S	ДИЭТИЛСУЛЬФИД	15,9531	2896,27	-54,49	390	260					7590,
191	C4H10S2	ДИЭТИЛДИСУЛЬФИД	16,0607	3421,57	-64,19	455	312					9010,
192	C4H11N	н-БУТИЛАМИН	16,6085	3012,70	-48,96	373	259					7670,
193	C4H11N	ИЗОБУТИЛАМИН	16,1419	2704,16	-56,15	373	251					7400,
194	C4H11N	ДИЭТИЛАМИН	16,0545	2595,01	-53,15	350	242	64,890	-5912,65	-6,955	3,73	6650,
195	C5H5N	ПИРИДИН	16,0910	3095,13	-61,15	425	285					8400,
196	C5H8	ЦИКЛОПЕНТЕН	15,9356	2583,07	-39,70	378	244					6450,
197	C5H8	1,2-ПЕНТАДИЕН	15,9297	2544,34	-44,30	340	250					6590,
198	C5H8	1-ТРАНС-3-ПЕНТАДИЕН	15,9182	2541,69	-41,43	340	250					6460,
199	C5H8	1,4-ПЕНТАДИЕН	15,7392	2344,02	-41,69	320	240					6010,
200	C5H8	1-ПЕНТИН	16,0429	2515,62	-45,97	335	230					

NO	ФОР- МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
201	C5H8	2-МЕТИЛ-1,3-БУТАДИЕН	15,8548	2467,40	—39,64	330	250					6230,
202	C5H8	3-МЕТИЛ-1,2-БУТАДИЕН	15,9880	2541,83	—42,26	335	250					6510,
203	C5H8O	ЦИКЛОПЕНТАНОН	16,0897	3193,92	—66,15	440	300					8740,
204	C5H8O2	ЭТИЛАКРИЛАТ	16,0890	2974,94	—58,15	409	274					7950,
205	C5H10	ЦИКЛОПЕНТАН	15,8574	2588,48	—41,79	345	230					6524,
206	C5H10	1-ПЕНТЕН	15,7646	2405,96	—39,63	325	220	51,816	—4694,26	—5,202	3,42	6022,
207	C5H10	ЦИС-2-ПЕНТЕН	15,8251	2459,05	—42,56	330	220	55,199	—4985,30	—5,668	3,51	6240,
208	C5H10	ТРАНС-2-ПЕНТЕН	15,9011	2495,97	—40,18	330	220	56,420	—5028,79	—5,853	3,62	6230,
209	C5H10	2-МЕТИЛ-1-БУТЕН	15,8260	2426,42	—40,36	325	220	60,581	—5160,84	—6,474	3,47	6094,
210	C5H10	2-МЕТИЛ-2-БУТЕН	15,9238	2521,53	—40,31	335	226	55,255	—5010,98	—5,671	3,71	6287,
211	C5H10	3-МЕТИЛ-1-БУТЕН	15,7179	2333,61	—36,33	315	210					5760,
212	C5H10O	ВАЛЕРЬЯНОВЫЙ АЛЬДЕГИД	16,1623	3030,20	—58,15	412	277					8040,
213	C5H10O	МЕТИЛ-Н-ПРОПИЛКЕТОН	16,0031	2934,87	—62,25	410	275					8000,
214	C5H10O	МЕТИЛИЗОПРОПИЛКЕТОН	14,1779	1993,12	—103,2	406	271					7320,
215	C5H10O	ДИЭТИЛКЕТОН	16,8138	3410,51	—40,15	400	275	111,20	—9773,63	—13,26	4,73	8060,
216	C5H10O2	Н-ВАЛЕРЬЯНОВАЯ КИСЛОТА	17,6306	4092,15	—86,55	495	350					11900,
217	C5H10O2	ИЗОБУТИЛФОРМИАТ	16,2292	2980,47	—64,15	409	278	58,420	—6314,51	—5,879	4,41	8170,
218	C5H10O2	Н-ПРОПИЛАЦЕТАТ	16,2291	2980,47	—64,15	410	280	69,656	—7028,88	—7,475	5,10	8170,
219	C5H10O2	ЭТИЛПРОПИОНАТ	16,1620	2935,11	—64,16	396	276	67,631	—6869,83	—7,193	4,98	8180,
220	C5H10O2	МЕТИЛБУТИРАТ						65,898	—6819,11	—6,941	4,98	8145,
221	C5H10O2	МЕТИЛИЗОБУТИРАТ						66,160	—6637,51	—7,016	4,79	7974,
222	C5H11N	ПИПЕРИДИН	16,1004	3015,46	—61,15	416	280					8180,
223	C5H12	Н-ПЕНТАН	15,8333	2477,07	—39,94	330	220	52,682	—4827,08	—5,313	3,68	6160,
224	C5H12	2-МЕТИЛБУТАН	15,6338	2348,67	—40,05	322	216	50,428	—4565,64	—5,021	3,55	5900,
225	C5H12	2,2-ДИМЕТИЛПРОПАН	15,2069	2034,15	—45,37	305	260	49,600	—4213,21	—4,977	3,31	5438,
226	C5H12O	1-ПЕНТАНОЛ	16,5270	3026,89	—105,0	411	310					10600,
227	C5H12O	2-МЕТИЛ-1-БУТАНОЛ	16,2708	2752,19	—116,3	402	307					10800,
228	C5H12O	3-МЕТИЛ-1-БУТАНОЛ	16,7127	3026,43	—104,1	426	298					10540,
229	C5H12O	2-МЕТИЛ-2-БУТАНОЛ	15,0113	1988,08	—137,8	375	298					9700,
230	C5H12O	2,2-ДИМЕТИЛ-1-ПРОПАНОЛ	18,1336	3694,96	—65,00	406	328					10300,
231	C5H12O	ЭТИЛПРОПИЛОВЫЙ ЭФИР	15,4539	2423,41	—62,28	360	246	58,911	—5663,85	—6,1	4,33	7290,
232	C6F6	ПЕРФТОРБЕНЗОЛ	16,1940	2827,53	—57,66	390	270	74,686	—6815,04	—8,318	5,39	
233	C6F12	ПЕРФТОРЦИКЛОГЕКСАН	13,9087	1374,07	—136,8	400	280	119,20	—8611,09	—14,89	6,04	
234	C6F14	ПЕРФТОР-Н-ГЕКСАН	15,8307	2488,59	—59,73	330	270	90,505	—7074,74	—10,78	7,33	
235	C6H4CL2	О-ДИХЛОРБЕНЗОЛ	16,2799	3798,23	—59,84	483	331					9480,
236	C6H4CL2	М-ДИХЛОРБЕНЗОЛ	16,8173	4104,13	—43,15	475	326					9230,
237	C6H4CL2	П-ДИХЛОРБЕНЗОЛ	16,1135	3626,83	—64,64	477	327					9270,
238	C6H5BR	БРОМБЕНЗОЛ	15,7972	3313,00	—67,71	450	320	56,566	—7005,23	—5,548	5,59	
239	C6H5CL	ХЛОРБЕНЗОЛ	16,0676	3295,12	—55,60	420	320	57,251	—6684,47	—5,686	4,98	8735,
240	C6H5F	ТОРБЕНЗОЛ	16,5487	3181,78	—37,59	370	250	55,141	—5819,21	—5,489	3,88	

NO	ФОР-МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
241	C6H5I	ИОДБЕНЗОЛ	16,1454	3776,53	-64,38	470	290	57,691	-7589,50	-5,646	6,46	9440
242	C6H6	БЕНЗОЛ	15,9008	2788,51	-52,36	377	280	52,10	-5557,61	-5,072	3,61	7352
243	C6H6O	ФЕНОЛ	16,4279	3490,89	-98,59	481	345	72,558	-9072,60	-7,516	4,42	10900
244	C6H7N	АНИЛИН	16,6748	3857,52	-73,15	500	340	65,881	-8442,37	-6,662	5,18	10000
245	C6H7N	4-МЕТИЛПИРИДИН	16,2143	3409,40	-62,65	460	300					8950,
246	C6H10	1,5-ГЕКСАДИЕН	16,1351	2728,54	-45,45	350	282					6561
247	C6H10	ЦИКЛОГЕКСЕН	15,8243	2813,53	-49,98	360	300					7280
248	C6H10O	ЦИКЛОГЕКСАНОН										9500
249	C6H12	ЦИКЛОГЕКСАН	15,7527	2766,63	-50,50	380	280	53,451	-5562,12	-5,303	4,22	7160
250	C6H12	МЕТИЛЦИКЛОПЕНТАН	15,8023	2731,00	-47,11	375	250					6950
251	C6H12	1-ГЕКСЕН	15,8089	2654,81	-47,30	360	240	55,909	-5423,07	-5,705	4,54	6760
252	C6H12	ЦИС-2-ГЕКСЕН	16,2057	2897,97	-39,30	370	245					6960
253	C6H12	ТРАНС-2-ГЕКСЕН	15,8727	2701,72	-48,62	365	245	60,438	-5734,51	-6,348	4,73	6910
254	C6H12	ЦИС-3-ГЕКСЕН	15,8384	2680,52	-48,40	365	245					6860
255	C6H12	ТРАНС-3-ГЕКСЕН	15,9288	2718,68	-47,77	365	245					6920
256	C6H12	2-МЕТИЛ-2-ПЕНТЕН	15,9423	2725,89	-47,64	370	245					6930,
257	C6H12	3-МЕТИЛ-ЦИС-2-ПЕНТЕН	15,9124	2731,79	-46,47	364	248					6890,
258	C6H12	3-МЕТИЛ-ТРАНС-2-ПЕНТЕН	15,9484	2750,50	-48,33	366	250					7000,
259	C6H12	4-МЕТИЛ-ЦИС-2-ПЕНТЕН	15,7527	2580,52	-46,56	352	238					6590,
260	C6H12	4-МЕТИЛ-ТРАНС-2-ПЕНТЕН	15,8425	2631,57	-46,00	354	240					6680,
261	C6H12	2,3-ДИМЕТИЛ-1-БУТЕН	15,8012	2612,69	-43,78	360	235					6550,
262	C6H12	2,3-ДИМЕТИЛ-2-БУТЕН	16,0043	2798,63	-47,71	375	250					7083,
263	C6H12	2,3-ДИМЕТИЛ-1-БУТЕН	15,3755	2326,80	-48,24	340	225					6130,
264	C6H12O	ЦИКЛОГЕКСАНОЛ						86,548	-9573,09	-9,539	5,86	10870,
265	C6H12O	МЕТИЛИЗОБУТИЛКЕТОН	15,7165	2893,66	-70,75	425	285					8500,
266	C6H12O2	Н-БУТИЛАЦЕТАТ	16,1836	3151,09	-69,15	435	295					8600,
267	C6H12O2	ИЗОБУТИЛАЦЕТАТ	16,1714	3092,83	-66,15	427	289					8568,
268	C6H12O2	ЭТИЛБУТИРАТ	15,9987	3127,60	-60,15	432	288					8200,
269	C6H12O2	ЭТИЛИЗОБУТИРАТ						74,336	-7477,19	-8,108	5,66	8365,
270	C6H12O2	Н-ПРОПИЛПРОПИОНАТ	16,8641	3558,18	-47,86	420	292					8690,
271	C6H14	Н-ГЕКСАН	15,8366	2697,55	-48,78	370	245	57,279	-5587,42	-5,885	4,778	6896,
272	C6H14	2-МЕТИЛПЕНТАН	15,7476	2614,38	-46,58	370	240	55,352	-5301,22	-5,65	4,911	6640,
273	C6H14	3-МЕТИЛПЕНТАН	15,7701	2653,43	-46,02	365	240	54,479	-5323,33	-5,509	4,579	6710,
274	C6H14	2,2-ДИМЕТИЛБУТАН	15,5536	2489,50	-43,81	350	230	51,470	-4910,28	-5,134	4,323	6287,
275	C6H14	2,3-ДИМЕТИЛБУТАН	15,6802	2595,44	-44,25	354	235	51,700	-5061,44	-5,138	4,472	6520,
276	C6H14O	1-ГЕКСАНОЛ	18,0994	4055,45	-76,49	430	308					11600,
277	C6H14O	ЭТИЛБУТИЛОВЫЙ ЭФИР	16,0477	2921,52	-55,15	400	265					7600,
278	C6H14O	ДИИЗОПРОПИЛОВЫЙ ЭФИР	16,3417	2895,73	-43,15	364	249					7010,
279	C6H15N	ДИПРОПИЛАМИН	16,5939	3259,08	-55,15	422	302					8840,
280	C6H15N	ТРИЭТИЛАМИН	15,8853	2882,38	-51,15	400	260					7500,

NO	ФОР-МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
281	C7F14	ПЕРФТОРМЕТИЛЦИКЛО-ГЕКС	15,7130	2610,57	—61,93	385	290	51,689	—5514,04	—5,004	5,47	
282	C7F16	ПЕРФТОР-Н-ГЕПТАН										
283	C7H5N	БЕНЗОНИТРИЛ	15,9747	2719,68	—64,50	390	270	83,896	—7348,95	—9,644	7,82	
284	C7H6O	БЕНЗАЛЬДЕГИД						59,774	—7912,31	—5,881	6,53	
285	C7H6O2	БЕНЗОЙНАЯ КИСЛОТА	16,3501	3748,62	—66,12	460	300					10200,
			17,1634	4190,70	—125,2	560	405					12100,
286	C7H8	ТОЛУОЛ										
287	C7H8O	МЕТИЛФЕНИЛОВЫЙ ЭФИР	16,0137	3096,52	—53,67	410	280	56,785	—6283,50	—5,681	4,84	7930,
288	C7H8O	ФЕНОЛ	16,2394	3430,82	—69,58	440	370					
289	C7H8O	О-КРЕЗОЛ	17,4582	4384,81	—73,15	603	385					12070,
290	C7H8O	М-КРЕЗОЛ	15,9148	3305,37	—108,0	480	370	75,616	—9341,59	—7,959	5,47	10800,
			17,2878	4274,42	—74,09	480	370	79,796	—9855,80	—8,509	6,14	11330,
291	C7H8O	П-КРЕЗОЛ										
292	C7H9N	2,3-ДИМЕТИЛПИРИДИН	16,1989	3479,39	—111,3	480	370	64,083	—8825,19	—6,316	5,42	11340,
293	C7H9N	2,5-ДИМЕТИЛПИРИДИН	17,1492	4219,74	—33,04	440	420					
294	C7H9N	3,4-ДИМЕТИЛПИРИДИН	16,3046	3545,14	—63,59	435	350					
295	C7H9N	3,5-ДИМЕТИЛПИРИДИН	16,9517	4237,04	—41,65	460	400					
			16,8850	4106,95	—44,45	460	400					
296	C7H9N	МЕТИЛФЕНИЛАМИН										
297	C7H9N	О-ТОЛУИДИН	16,3066	3756,28	—80,71	480	320					
298	C7H9N	М-ТОЛУИДИН	16,7834	4072,58	—72,15	500	375					10835,
299	C7H9N	П-ТОЛУИДИН	16,7498	4080,32	—73,15	500	355					10900,
300	C7H14	ЦИКЛОГЕПТАН	16,6968	4041,04	—72,15	500	350					10700,
			15,7818	3066,05	—56,80	435	330					7900,
301	C7H14	1,1-ДИМЕТИЛЦИКЛОПЕНТА										
302	C7H14	ЦИС-1,2-ДИМЕТИЛЦИКЛОП	15,6973	2807,94	—51,20	390	260					7240,
303	C7H14	ТРАНС-1,2-ДИМЕТИЛЦИКЛ	15,7729	2922,30	—52,94	400	270					7576,
304	C7H14	ЭТИЛЦИКЛОПЕНТАН	15,7594	2861,53	—51,46	390	260					7375,
305	C7H14	МЕТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8581	2990,13	—52,47	402	270					7715,
			15,7105	2926,04	—51,75	400	270	52,902	—5797,19	—5,199	5,23	7440,
306	C7H14	1-ГЕПТАН										
307	C7H14	2,3,3-ТРИМЕТИЛ-1-БУТЕН	15,8894	2895,51	—53,97	400	265	60,035	—6147,41	—6,211	5,70	7430,
308	C7H16	Н-ГЕПТАН	15,6536	2719,47	—49,56	375	253					6900,
309	C7H16	2-МЕТИЛГЕКСАН	15,8737	2911,32	—56,51	400	270	61,276	—6303,87	—6,373	6,00	7576,
310	C7H16	3-МЕТИЛГЕКСАН	15,8261	2845,06	—53,60	390	264	60,131	—6074,01	—6,244	5,79	7330,
			15,8133	2855,66	—53,93	390	265	59,325	—6059,25	—6,123	5,72	7360,
311	C7H16	2,2-ДИМЕТИЛПЕНТАН										
312	C7H16	2,3-ДИМЕТИЛПЕНТАН	15,6917	2740,15	—49,85	378	254	55,514	—5590,61	—5,636	5,49	6970,
313	C7H16	2,4-ДИМЕТИЛПЕНТАН	15,7815	2850,64	—51,33	388	262	57,249	—5882,73	—5,843	5,58	7263,
314	C7H16	3,3-ДИМЕТИЛПЕНТАН	15,7179	2744,78	—51,52	378	256					7050,
315	C7H16	3-ЭТИЛПЕНТАН	15,7190	2829,10	—47,83	385	260	54,572	—5634,72	—5,487	5,49	7086,
			15,8317	2882,44	—53,26	392	266					7399,
316	C7H16	2,2,3-ТРИМЕТИЛБУТАН										
317	C7H16O	1-ГЕПТАНОЛ	15,6398	2764,40	—47,10	379	254	52,761	—5431,67	—5,251	5,37	6919,
318	C8H4O3	ФТАЛЕВЫЙ АНГИДРИД	15,3068	2626,42	—146,6	449	333					11500,
319	C8H8	СТИРОЛ	15,9984	4467,01	—83,15	615	409					11850,
320	C8H8O	МЕТИЛФЕНИЛКЕТОН	16,0193	3328,57	—63,72	460	305					8800,
			16,2384	3781,07	—81,15	520	350					

NO	ФОР- МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
321	C8H8O2	МЕТИЛБЕНЗОАТ	16,2272	3751,83	—81,15	516	350					10300,
322	C8H10	О-КСИЛОЛ	16,1156	3395,57	—59,46	445	305	61,763	—7149,21	—6,302	6,11	8800,
323	C8H10	М-КСИЛОЛ	16,1390	3366,99	—58,04	440	300	55,493	—6666,23	—5,436	6,08	8690,
324	C8H10	П-КСИЛОЛ	16,0963	3346,65	—57,84	440	300	56,175	—6673,70	—5,543	6,19	8600,
325	C8H10	ЭТИЛБЕНЗОЛ	16,0195	3279,47	—59,95	450	300	58,100	—6792,54	—5,802	5,75	8500,
326	C8H10O	О-ЭТИЛФЕНОЛ	17,9610	4928,36	—45,75	500	350					11490,
327	C8H10O	М-ЭТИЛФЕНОЛ	17,1955	4272,77	—86,08	500	370					12140,
328	C8H10O	П-ЭТИЛФЕНОЛ	19,0905	5579,62	—44,15	500	370					12100,
329	C8H10O	ФЕНЕТОЛ	16,1673	3473,20	—78,66	460	385					
330	C8H10O	2,3-КСИЛЕНОЛ	16,2424	3724,58	—102,4	500	420					11300,
331	C8H10O	2,4-КСИЛЕНОЛ	16,2456	3655,26	—103,8	500	410					11260,
332	C8H10O	2,5-КСИЛЕНОЛ	16,2368	3667,32	—102,4	490	410					11200,
333	C8H10O	2,6-КСИЛЕНОЛ	16,2809	3749,35	—85,55	480	400					10600,
334	C8H10O	3,4-КСИЛЕНОЛ	16,3004	3733,53	—113,9	520	430					11900,
335	C8H10O	3,5-КСИЛЕНОЛ	16,4192	3775,91	—109,0	500	410					11800,
336	C8H11N	N,N-ДИМЕТИЛАНИЛИН	16,9647	4276,08	—52,80	480	345					
337	C8H16	1,1-ДИМЕТИЛЦИКЛОГЕКСА	15,6535	3043,34	—55,30	420	283	52,143	—6026,09	—5,055	6, 0	7790,
338	C8H16	ЦИС-1,2-ДИМЕТИЛЦИКЛОГ	15,7438	3148,35	—57,31	430	290	56,130	—6431,82	—5,595	6,56	8040,
339	C8H16	ТРАНС-1,2-ДИМЕТИЛЦИКЛ	15,7337	3117,43	—54,02	424	286	53,523	—6162,66	—5,245	6,38	7860,
340	C8H16	ЦИС-1,3-ДИМЕТИЛЦИКЛОГ	15,7470	3081,95	—55,08	420	284					7840,
341	C8H16	ТРАНС-1,3-ДИМЕТИЛЦИКЛ	15,7371	3093,95	—57,76	425	288	56,097	—6271,67	—5,615	6,29	8090,
342	C8H16	ЦИС-1,4-ДИМЕТИЛЦИКЛОГ	15,7333	3098,39	—57,00	425	287	53,571	—6219,26	—5,233	6,29	8070,
343	C8H16	ТРАНС-1,4-ДИМЕТИЛЦИКЛ	15,6984	3063,44	—54,57	420	283	52,909	—6071,72	—5,163	6,20	7790,
344	C8H16	ЭТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8125	3183,25	—58,15	433	293					8200,
345	C8H16	1,1,2-ТРИМЕТИЛЦИКЛОПЕ	15,7084	3015,51	—54,59	414	279					7790,
346	C8H16	1,1,3-ТРИМЕТИЛЦИКЛОПЕ	15,6794	2938,09	—53,25	404	273					7570,
347	C8H16	ЦИС. ЦИС. ТРАНС-1,2,4-	15,7543	3073,95	—54,2	418	283					7900,
348	C8H16	ЦИС. ТРАНС. ЦИС-1,2,-	15,7756	3009,70	—53,23	417	282					7900,
349	C8H16	1-МЕТИЛ-1-ЭТИЛЦИКЛОПЕ	15,8222	3120,66	—55,06	422	286					8040,
350	C8H16	Н-ПРОПИЛЦИКЛОПЕНТАН	15,8969	3187,67	—59,99	431	294					8152,
351	C8H16	ИЗОПРОПИЛЦИКЛОПЕН- ТАН	15,8561	3176,22	—55,18	427	289					8150
352	C8H16	1-ОКТЕН	15,9630	3116,52	—60,39	420	288	64,487	—6883,34	—6,765	6,98	8070,
353	C8H16	ТРАНС-2-ОКТЕН	15,8554	3134,97	—58,0	425	289					8200,
354	C8H18	Н-ОКТАН	15,9426	3120,29	—63,63	425	292	66,639	—7100,69	—7,053	7,31	8225,
355	C8H18	2-МЕТИЛГЕПТАН	15,9278	3079,63	—59,46	417	285	65,685	—6865,40	—6,957	7,12	8080,
356	C8H18	3-МЕТИЛГЕПТАН	15,8865	3065,96	—60,74	418	286	64,371	—6817,44	—6,763	7,02	8100,
357	C8H18	4-МЕТИЛГЕПТАН	16,8893	3057,05	—60,59	417	285	64,394	—6799,54	—6,769	6,98	8100,
358	C8H18	2,2-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,7431	2932,56	—58,08	405	276	61,971	—6425,90	—6,475	6,72	7710,
359	C8H18	2,3-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,8189	3029,06	—58,99	415	283	61,855	—6587,23	—6,425	6,79	7736,
360	C8H18	2,4-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,7797	2965,44	—58,36	408	278	62,103	—6487,48	—6,482	6,74	7790,

NO	ФОР- МУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HABA	HARB	HARC	HARD	HV
361	C8H18	2,5-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,7954	2964,06	-56,74	408	278	62,872	-6532,90	-6,590	6,84	7800,
362	C8H18	3,3-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,7755	3011,51	-55,71	411	279	59,518	-6352,78	-6,118	6,69	7760,
363	C8H18	3,4-ДИМЕТИЛГЕКСАН	15,8415	3062,52	-58,29	417	284	61,319	-6588,72	-6,344	6,76	7953,
364	C8H18	3-ЭТИЛГЕКСАН	15,8671	3057,57	-60,55	418	286					8033,
365	C8H18	2,2,3-ТРИМЕТИЛПЕНТАН	15,7162	2981,56	-54,73	409	277	58,179	-6218,74	-5,942	6,54	7650,
366	C8H18	2,2,4-ТРИМЕТИЛПЕНТАН	15,6850	2896,28	-52,41	398	269	58,265	-6039,34	-5,988	6,48	7411,
367	C8H18	2,3,3-ТРИМЕТИЛПЕНТАН	15,7578	3057,94	-52,77	415	280	56,436	-6186,92	-5,685	6,56	7730,
368	C8H18	2,3,4-ТРИМЕТИЛПЕНТАН	15,7818	3028,09	-55,62	413	280	58,957	-6346,90	-6,033	6,61	7823,
369	C8H18	2-МЕТИЛ-3-ЭТИЛПЕНТАН	15,8040	3055,08	-57,84	415	282					7879,
370	C8H18	3-МЕТИЛ-3-ЭТИЛПЕНТАН	15,8126	3102,06	-53,47	418	283					7838,
371	C8H18O	1-ОКТАНОЛ	15,7428	3017,81	-137,1	468	343					12100,
372	C8H18O	2-ОКТАНОЛ	14,7108	2441,66	-150,7	453	345					10600,
373	C8H18O	2-ЭТИЛГЕКСАНОЛ	15,3614	2773,46	-140,0	458	348					11130,
374	C8H18O	БУТИЛОВЫЙ ЭФИР	16,0778	3296,15	-66,15	455	305					8900,
375	C8H19N	ДИБУТИЛАМИН	16,7307	3721,90	-64,15	459	322					9500,
376	C9H10	АЛЬФА-МЕТИЛСТИРОЛ	16,3308	3644,30	-67,15	493	348					9150,
377	C9H10O2	ЭТИЛБЕНЗОАТ	16,2065	3845,09	-84,15	531	361					10700,
378	C9H12	Н-ПРОПИЛБЕНЗОЛ	16,0062	3433,84	-66,01	461	316					9140,
379	C9H12	ИЗОПРОПИЛБЕНЗОЛ	15,9722	3363,60	-63,37	454	311	46,941	-6285,25	-4,227	6,86	8970,
380	C9H12	1-МЕТИЛ-2-ЭТИЛБЕНЗОЛ	16,1253	3535,33	-65,85	467	321	64,337	-7662,94	-6,617	7,18	9290,
381	C9H12	1-МЕТИЛ-3-ЭТИЛБЕНЗОЛ	16,1545	3521,08	-64,64	463	318	65,670	-7678,11	-6,815	7,20	9210,
382	C9H12	1-МЕТИЛ-4-ЭТИЛБЕНЗОЛ	16,1135	3516,31	-64,23	463	318	61,404	-7422,59	-6,212	7,23	9180,
383	C9H12	1,2,3-ТРИМЕТИЛБЕНЗОЛ	16,2121	3670,22	-66,07	479	329					9570,
384	C9H12	1,2,4-ТРИМЕТИЛБЕНЗОЛ	16,2190	3622,58	-64,59	471	324	56,241	-7256,56	-5,459	7,27	9380,
385	C9H12	1,3,5-ТРИМЕТИЛБЕНЗОЛ	16,2893	3614,19	-63,57	466	321	58,041	-7326,78	-5,706	7,22	9330,
386	C9H18	Н-ПРОПИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8567	3363,62	-65,21	459	313					8620,
387	C9H18	ИЗОПРОПИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8260	3346,12	-63,71	440	330					
388	C9H18	1-НОНЕН	16,0118	3305,03	-67,61	448	308	69,085	-7626,91	-7,339	8,38	8680,
389	C9H20	Н-НОНАН	15,9671	3291,45	-71,33	452	312	73,133	-7969,42	-7,89	8,69	8823,
390	C9H20	2,2,3-ТРИМЕТИЛГЕКСАН	15,8017	3164,17	-61,66	436	297					8310,
391	C9H20	2,2,4-ТРИМЕТИЛГЕКСАН	15,7639	3084,08	-61,94	428	291					8130,
392	C9H20	2,2,5-ТРИМЕТИЛГЕКСАН	15,7445	3052,17	-62,24	420	315					8070,
393	C9H20	3,3-ДИЭТИЛПЕНТАН	15,8709	3341,62	-57,57	440	350					8600,
394	C9H20	2,2,3,3-ТЕТРАМЕТИЛПЕН	15,7280	3220,55	-59,31	440	328	64,104	-7011,38	-6,731	8,46	8430,
395	C9H20	2,2,3,4-ТЕТРАМЕТИЛПЕН	15,7363	3167,42	-58,21	430	318					8190,
396	C9H20	2,2,4,4-ТЕТРАМЕТИЛПЕН	15,6488	3049,98	-57,13	413	313					7850,
397	C9H20	2,3,3,4-ТЕТРАМЕТИЛПЕН	15,8029	3269,07	-58,19	425	325					8350,
398	C10H8	НАФТАЛИН	16,1426	3992,01	-71,29	525	360					10340,
399	C10H12	1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОНАФ	16,2805	4009,49	-64,89	500	365					9490,
400	C10H14	Н-БУТИЛБЕНЗОЛ	16,0793	3633,40	-71,77	486	335					9380,

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
401	C10H14	ИЗОБУТИЛБЕНЗОЛ	15,9524	3512,47	-69,03	476	326					9040,
402	C10H14	ВТОР-БУТИЛБЕНЗОЛ	15,9999	3544,19	-68,10	476	323					9070,
403	C10H14	ТРЕТ-БУТИЛБЕНЗОЛ	15,9300	3462,28	-69,87	472	32					8990,
404	C10H14	1-МЕТИЛ-2-ИЗОПРОПИЛБЕ	15,9809	3564,52	-70,00	481	330					9110,
405	C10H14	1-МЕТИЛ-3-ИЗОПРОПИЛБЕ	15,9811	3543,79	-69,22	478	328	67,726	-8033,58	-7,076	8,39	
406	C10H14	1-МЕТИЛ-4-ИЗОПРОПИЛБЕ	15,9424	3539,21	-70,10	480	329	63,225	-7800,97	-6,432	8,41	
407	C10H14	1,4-ДИЭТИЛБЕНЗОЛ	16,1140	3657,22	-71,18	487	335					9410,
408	C10H14	1,2,4,5-ТЕТРАМЕТИЛБЕН	16,3023	3850,91	-71,72	500	361	64,139	-8300,92	-6,478	8,80	10880,
409	C10H15N	Н-БУТИЛАНИЛИН	16,3994	4079,72	-96,15	560	385					11690,
410	C10H18	ЦИС-ДЕКАЛИН	15,8312	3671,61	-69,74	495	368					9400,
411	C10H18	ТРАНС-ДЕКАЛИН	15,7989	3610,66	-66,49	470	363					9200,
412	C10H19N	КАПРИЛОНИТРИЛ	15,9116	3542,57	-72,32	485	332					9200,
413	C10H20	Н-БУТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8141	3437,99	-69,99	455	355					
414	C10H20	ИЗОБУТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,8670	3524,57	-70,78	470	360					
415	C10H20	ВТОР-БУТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,7884	3457,85	-67,04	450	357					
416	C10H20	ТРЕТ-БУТИЛЦИКЛОГЕКСАН	15,7884	3457,85	-67,04	450	357					
417	C10H20	1-ДЕЦЕН	16,0129	3448,18	-76,09	460	356	73,938	-8380,48	-7,95	9,90	9240,
418	C10H22	Н-ДЕКАН	16,0114	3456,80	-76,67	476	330	75,475	-8563,64	-8,149	10,20	9388,
419	C10H22	3,3,5-ТРИМЕТИЛГЕПТАН	15,7848	3305,20	-67,66	458	313					8760,
420	C10H22	2,2,3,3-ТЕТРАМЕТИЛГЕК	15,7598	3371,05	-64,09	463	314					8690,
421	C10H22	2,2,5,5-ТЕТРАМЕТИЛГЕК	15,8446	3172,92	-66,15	438	300					8430
422	C10H22O	1-ДЕКАНОЛ	15,9395	3389,43	-139,	503	376					12000,
423	C11H10	1-МЕТИЛНАФТАЛИН	16,2008	4206,70	-78,15	551	380					11000,
424	C11H10	2-МЕТИЛНАФТАЛИН	16,2758	4237,37	-74,75	548	377					11000,
425	C11H14O2	БУТИЛБЕНЗОАТ	16,3363	4158,47	-94,15	570	390					11700,
426	C11H22	Н-ГЕКСИЛЦИКЛОПЕНТАН	16,0140	3702,56	-81,55	507	351					9840,
427	C11H22	1-УНДЕЦЕН	16,0412	3597,72	-83,41	496	345	78,295	-9105,75	-8,489	11,46	9770,
428	C11H24	Н-УНДЕКАН	16,0541	3614,07	-85,45	498		80,121	-9305,80	-8,729	11,75	9920,
429	C12H10	ДИФЕНИЛ	16,6832	4002,23	-70,42	545	343					10900,
430	C12H10O	ДИФЕНИЛЛОВЫЙ ЭФИР	16,3459	4310,25	-87,31	598	418					11260,
431	C12H24	Н-ГЕПТИЛЦИКЛОПЕНТАН	16,0589	3850,38	-88,75	529	368					10360,
432	C12H24	1-ДОДЕКАН	16,0610	3729,87	-90,88	517	361	82,968	-9846,99	-9,073	13,10	10270,
433	C12H26	Н-ДОДЕКАН	16,1134	3774,56	-91,31	520	364	84,248	-10012,5	-9,236	13,37	10430,
434	C12H26O	ДИГЕКСИЛОВЫЙ ЭФИР	16,3372	3982,78	-89,15	545	373					10900,
435	C12H26O	ДОДЕКАНОЛ	15,2638	3242,04	-157,1	580	407					
436	C12H27N	ТРИБУТИЛАМИН	16,2878	3865,58	-86,15	531	362					10600,
437	C13H12	ДИФЕНИЛМЕТАН	14,4856	2902,44	-167,9	563	473					
438	C13H26	Н-ОКИЛЦИКЛОПЕНТАН	16,0941	3983,01	-95,85	549	385					10850,
439	C13H26	1-ТРИДЕЦЕН	16,0850	3856,23	-97,94	537	377	88,010	-10609,4	-9,709	15,00	10750,
440	C13H28	Н-ТРИДЕКАН	16,1355	3892,91	-98,93	540	380					10910,

NO	ФОРМУЛА	НАИМЕНОВАНИЕ	ANTA	ANTB	ANTC	TMX	TMN	HARA	HARB	HARC	HARD	HV
441	C14H10	АНТРАЦЕН	17,6701	6492,44	—26,13	655	490					13500,
442	C14H10	ФЕНАНТРЕН	16,7187	5477,94	—69,39	655	450					13300,
443	C14H28	Н-НОНИЛЦИКЛОПЕН- ТАН	16,1089	4096,30	—103,0	569	400					11290,
444	C14H28	1-ТЕТРАДЕЦЕН	16,1643	4018,01	—102,7	557	392	92,474	—11329,2	—10,27	17,07	11210,
445	C14H30	Н-ТЕТРАДЕКАН	16,1480	4008,52	—105,4	560	394	91,172	—11322,9	—10,07	16,66	11380,
446	C15H30	Н-ДЕЦИЛЦИКЛОПЕН- ТАН	16,1261	4203,94	—109,7	586	413					11710,
447	C15H30	1-ПЕНТАДЕЦЕН	16,1539	4103,15	—110,6	574	406	98,920	—12205,3	—11,09	19,16	11630,
448	C15H32	Н-ПЕНТАДЕКАН	16,1724	4121,51	—111,8	577	408	95,000	—11995,6	—10,54	18,45	11820,
449	C16H22O4	ДИБУТИЛ-О-ФТАЛАТ	16,9539	4852,47	—138,1	657	469					18900,
450	C16H32	Н-ДЕЦИЛЦИКЛОГЕК- САН	16,1627	4373,37	—111,8	573	463					12040,
451	C16H32	1-ГЕКСАДЕЦЕН	16,2203	4245,00	—115,2	592	420	105,90	—13117,0	—11,99	21,68	12050,
452	C16H34	Н-ГЕКСАДЕКАН	16,1841	4214,91	—118,7	594	423	95,680	—12411,3	—10,58	20,27	12240,
453	C17H34	Н-ДОДЕЦИЛЦИКЛО- ПЕНТАН	16,1915	4395,87	—124,2	619	441					12570,
454	C17H36O	ГЕПТАДЕКАНОЛ	15,6161	3672,62	—188,1	656	464					14500,
455	C17H36	Н-ГЕПТАДЕКАН	16,1510	4294,55	—124,0	610	434					12640,
456	C18H14	О-ТЕРФЕНИЛ										
457	C18H14	М-ТЕРФЕНИЛ										
458	C18H14	П-ТЕРФЕНИЛ										
459	C18H36	1-ОКТАДЕЦЕН	16,2221	4416,13	—127,3	623	444					12970,
460	C18H36	Н-ТРИДЕЦИЛЦИКЛО- ПЕНТАН	16,2270	4483,13	—131,3	634	453					12980,
461	C18H38	Н-ОКТАДЕКАН	16,1232	4361,79	—129,9	625	445					13020,
462	C18H38O	1-ОКТАДЕКАНОЛ	15,6898	3957,82	—193,1	658	474					
463	C19H38	Н-ТЕТРАДЕЦИЛЦИК- ЛОПЕНТ	16,2632	4439,38	—138,1	648	465					13380,
464	C19H40	Н-НОНАДЕКАН	16,1533	4450,44	—135,6	639	456					13390,
465	C20H40	Н-ПЕНТАДИЦИЛЦИК- ЛОПЕНТ	16,3092	4642,01	—145,1	661	476					13780,
466	C20H42	Н-ЭЙКОЗАН	16,4685	4680,46	—141,1	652	471					13740,
467	C20H42O	1-ЭЙКОЗАНОЛ	15,8233	3912,10	—203,1	679	492					15600,
468	C21H42	Н-ГЕКСАДЕЦИЛЦИК- ЛОПЕНТ	16,3553	4715,69	—152,1	674	488					14180,