



N° d'ordre :  
N° de série :

Université Kasdi Merbah Ouargla

**FACULTE DES SCIENCES  
ET SCIENCES DE L'INGENIEUR**

**DEPARTEMENT DE GENIE DES PROCÉDES**

Mémoire  
Présenté pour l'obtention du diplôme de

**MAGISTER**

Spécialité : Génie des procédés  
Option : Génie chimique

Par : **LAOUINI Salah Eddine**

*Thème*

**ELABORATION D'UN PROGRAMME DE CALCUL DES  
STRUCTURES CHIMIQUES DES COMPOSES ORGANIQUES**

Soutenu publiquement le : 15 /03/2005

Devant le jury composé de :

Dr. Ouahrani M<sup>ed</sup> Reda  
Dr. Malek Rassoul Yacine Al Hillo  
Dr. Sakhri Lakhdar  
Dr. Ladjel Segni

M.C. Université de Ouargla  
Pr. Université d'Om El-Bouaghi  
Pr. Université de Ouargla  
M.C. Université de Ouargla

Président  
Examineur  
Examineur  
Rapporteur

**Résumé :**

Ce travail de recherche rentre dans le cadre de développement de logiciel de Calcul des propriétés spectroscopiques des composés organiques en se basant sur les caractéristiques spectrales des molécules.

Généralement dans la recherche de la structure chimique des composés organiques ont recourt le plus souvent à différentes techniques d'analyses spectrales tel que : La spectrométrie de masse, l'infrarouge, l'ultra violet et la résonance magnétique nucléaire du proton et du carbone treize, le programme développé utilise une banque de donnée qui aide à régler le problème de la détermination de la structure des molécules organiques à partir de leur données spectrales.

Le programme réalisé utilise le langage Fortran 90, il est constitué de plusieurs bases de données, chacune correspondant à une méthode d'analyse. A partir des données spectrales il donne les propriétés correspondantes.

**Mots clés :** Spectroscopie des composés organiques, SM, UV, IR, RMN, Simulation.

**Abstract:**

This work of research goes in the setting of development of software of Calculation of the spectroscopic properties of the organic compounds while being based on the spectral features of the molecules.

Generally in the research of the chemical structures of the organic compounds have resorted the most often to techniques of spectral analyses as: The spectrometry of mass, the infrared, the ultraviolet and the nuclear magnetic resonance of the proton and the carbon thirteen, the developed program uses a data base of given them that helps to settle the problem of the determination of structure of the organic molecules from given them spectral.

The achieved program uses the language Fortran 90; it is constituted of several bases of given, each correspondent to a method of analysis. From given them spectral it gives the corresponding properties.

**Key words:** Spectroscopy, MS, UV, IR, RMN, Simulation.

# DEDICACE

*Je dédie ce mémoire à :*

*Ma chère mère*

*Mon cher père*

*Mes chers frères (Tarek, Bougdadi, Idrisse et Ibrahim)*

*Mes chères sœurs (Yasmina, Noura, Soumaia et la petite Marwa)*

*A toute ma famille*

*A tout mes amis (Mosbah, Rachid, Imad, Abd El-hamide,*

*abd El-rrahim, Mohammed, farhat, Nadji, Othmane, Yacine,*

*Soufiane, Walide, Hamz .....*

*A tous*

SALAH EDDINE

# REMERCIEMENTS

*Je remercie Dieu le tout puissant qui ma donné du courage, la patience et la force jusqu'à la fin de ce modeste travail.*

*Il est difficile d'exprimer, en quelques mots ma profonde gratitude et mon sincère remerciement pour les aides précieuses, les conseils utiles et l'encouragement de mon promoteur et mon enseignant Monsieur LADJAL SEGNI, maître de conférence à l'université Kasdi Merbah Ouargla.*

*Je remercie les professeurs de département de génie de procédés, particulièrement, Monsieur OUAHRANI M<sup>ED</sup> REDHA, maîtres de conférence et le professeur Monsieur SAKHRI LAKHDAR à l'université Kasdi Merbah Ouargla.*

*Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur KORICHI MOURAD maître assistant chargé des cours à l'université Kasdi Merbah Ouargla pour tous les conseils et les aides.*

*Je remercie respectivement monsieur BOUCHKIMA BACHIR, professeur à l'université Kasdi Merbah Ouargla et chef de projet et conseiller de la promotion magister génie de procédés.*

*J'aimerais remercier spécialement mon collègue Monsieur MENNOUCHE DJAMEL pour toutes les aides pendant l'élaboration du programme informatique.*

*Je tiens également à remercier mes collègues chacun son nom (SOUAAD, FATIMA, AÏCHA, NACER EDDINE, DJAMEL, BABA HANNI, ABD EL-HAKIM, BAKHTI, MOHAMMED, CHAWKI, SAMIR ET EL-IDE) de la promotion de magister génie de procédés.*

*Sans oublier, de remercier tous ceux qu'ils m'ont aidé de près ou de loin pour réaliser ce travail.*

# *Sommaire*

# Sommaire

Liste des tableaux.....	VIII
Liste des figures.....	X
Introduction.....	1

## Partie théorique

### Chapitre I : Spectrométrie de masse

I.1-Introduction.....	3
I.2-Principe.....	3
I.3-Instrumentation.....	5
I.3.1-Introduction de l'échantillon dans la source.....	7
I.3.2-Mode d'ionisation en spectrométrie de masse.....	7
I.3.3-Séparation des ions et analyse des rapports m/z.....	8
I.3.4-Les détecteurs.....	9
I.4-Ion moléculaire et détermination de la formule du composé organique.....	10
I.5-Principales réactions de fragmentation des molécules organique.....	11

### Chapitre II : Spectrométrie d'absorption de l'ultraviolet/visible

II.1-Introduction.....	57
II.2-Le domaine spectral UV-Visible et l'origine des absorptions.....	57
II.3-Le spectre UV-Visible et l'absorption lumineuse.....	58
II.4-Transitions électroniques des composés organiques.....	59
II.4.1-Transition $\sigma \rightarrow \sigma^*$ .....	59
II.4.2-Transition $n \rightarrow \sigma^*$ .....	60

II.4.3-Transition $n \rightarrow \pi^*$ .....	60
II.4.4-Transition $\pi \rightarrow \pi^*$ .....	60
II.5-Groupement chromophore.....	61
II.6-Effet due aux solvants (solvachromi).....	63
II.7-Effet sur le coefficient d'absorption.....	63
II.8-Instrumentation dans UV-Visible.....	64
II.8.1-Les sources lumineuses.....	64
II.8.2-Les systèmes dispersifs.....	64
II.8.3-Les détecteurs.....	64
II.9-Méthodes utilisées en analyse quantitative.....	65
II.10-Approche générale.....	65

### Chapitre III : Spectrométrie infrarouge

III.1-Introduction.....	67
III.2-Origine de l'absorption lumineuse dans l'infrarouge.....	67
III.3-Présentation des absorptions dans l'infrarouge.....	67
III.4-Modèle simplifié pour les vibrations des liaisons vibrationnelles.....	68
III.5-Spectromètre et analyseur infrarouge.....	69
III.6-Spectromètre IR classiques (scanning).....	71
III.6.1-La source de radiation.....	71
III.6.2-Les matériaux optiques.....	71
III.6.3-Les détecteurs.....	71
III.7-Spectromètres IR a transformée de Fourier.....	72
III.8-Préparation des échantillons.....	72
III.8.1-Mesure en phase gazeuse.....	72
III.8.2-Mesure à l'état liquide.....	72
III.8.3-Mesure en solution.....	72
III.8.4-Mesure à l'état solide.....	73
III.9-Interprétation du spectre.....	73
III.10-Absorption caractéristiques des groupes dans les molécules organiques.....	74
III.11-Spectroscopie Raman.....	75

## Chapitre IV : Spectrométrie de résonance magnétique nucléaire

IV.1-Généralités.....	88
IV.2-Phénomène de résonance.....	88
IV.3-Déplacements chimiques .....	91
IV.3.1-Les ppm.....	93
IV.3.2-Intensité du pic.....	93
IV.4-Origine du couplage spin-spin.....	93
IV.5-Spectroscopie de RMN- <sup>1</sup> H.....	94
IV.5.1-Préparation des échantillons et obtention des spectres.....	94
IV.5.2-Déplacements chimiques de <sup>1</sup> H.....	95
IV.5.3-Couplage <sup>1</sup> H, <sup>1</sup> H.....	95
IV.5.4-Corrélation des déplacements chimiques de <sup>1</sup> H .....	96
IV.6-Spectroscopie de RMN- <sup>13</sup> C.....	104
IV.6.1-Préparation des échantillons et enregistrement des spectres.....	104
IV.6.2-Déplacement chimique de <sup>13</sup> C.....	104

## Partie calcul

### Chapitre I : Présentation du programme

I.1- Introduction.....	110
I.2- Présentation du programme.....	110
I.2.1-Calcul de la formule brute d'un composé analysé.....	113
I.2.2- Calcul des principaux fragments du composé.....	113
I.2.3-Calcul des propriétés vis-à-vis la spectroscopie ultraviolet du composé analysé..	113
I.2.4-Calcul des principaux groupes fonctionnels des composés analysés.....	113
I.2.5-Calcul des propriétés spectroscopiques vis-à-vis de la résonance magnétique nucléaire de proton.....	114
I.2.6-Calcul des propriétés spectroscopiques vis-à-vis de la résonance magnétique nucléaire de carbone treize.....	114
I.2.6-Programme d'identification des principales propriétés spectroscopiques des composés organiques avec le langage Fortran 90.....	115



I.2.7-les bases de données utilisées dans le programme.....	123
◆ La base de données réalisée pour déterminer la formule brute du composé analysé et le nombre d'insaturation (DBE).....	123
◆ La base de données réalisée dans le programme pour déterminer les structures imputées des principaux fragments perdus.....	187
◆ La base de données réalisée pour déterminer les groupes fonctionnels.....	190
◆ La base de données réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes supportés le proton.....	193
◆ La base de données réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes de carbone.....	195

## **Chapitre II : Interprétation et discussion des résultats**

II.1-Introduction.....	196
II.2-Interprétation et comparaison des résultats du programme .....	196
II.3-Discussion des résultats.....	208
Conclusion.....	210
Références bibliographiques.....	211

**Liste des tableaux**

<b>Le titre</b>	<b>la page</b>
<b>Tableau 1</b> : Quelques gaz réactionnels utilisés en ionisation chimique	8
<b>Tableau 2</b> : Abondance relatives des isotopes d'éléments courants	11
<b>Tableau 3</b> : Masses et rapports d'abondance isotopique pour diverses combinaisons de carbone, d'hydrogène, d'azote et d'oxygène	15
<b>Tableau 4</b> : Quelques groupes chromophores avec son ondes d'absorption et coefficient d'absorption	62
<b>Tableau 5</b> : Les différents effets de solvant ou de substituant en UV/Visible	63
<b>Tableau 6</b> : Bandes d'absorptions de (C—H)	76
<b>Tableau 7</b> : Bandes d'absorptions de liaison (C—H) particulière	76
<b>Tableau 8</b> : (C—H) dans les alcènes, les alcynes et les composés aromatiques	77
<b>Tableau 9</b> : Bandes d'absorptions (O—H) alcoolique et phénolique	78
<b>Tableau 10</b> : Vibration d'élongation de (N—H) dans les amines, ammonium et amide	79
<b>Tableau 11</b> : Vibration de déformation de (N—H)	79
<b>Tableau 12</b> : Absorption des triples liaisons $X\equiv Y$	80
<b>Tableau 13</b> : Absorption des doubles liaisons cumulées $X=Y=Z$	81
<b>Tableau 14</b> : Absorption carbonyle de C=O (toutes les bandes mentionnées ont une forte intensité)	82
<b>Tableau 15</b> : Bandes d'absorptions des imines, oximes et C=N	84
<b>Tableau 16</b> : Bandes d'absorptions des composés azoïques —N=N—	85
<b>Tableau 17</b> : Bandes d'absorptions des alcènes (C=C)	85
<b>Tableau 18</b> : Absorption du groupement nitro, nitroso et nitrites(vibration d'élongation de C=O)	86

**Liste des figures**

<b>Le titre</b>	<b>la page</b>
<b>Figure 1</b> : Séparation des masses	4
<b>Figure 2</b> : Le spectre de masse de méthyle benzène ester en impact électronique	5
<b>Figure 3</b> : Schéma de principe d'un spectromètre a deux analyseurs et contrôle en feedback par l'ordinateur	6
<b>Figure 4</b> : Le spectre UV/Visible de l'acide acétique	59
<b>Figure 5</b> : Comparatif des transitions les plus rencontrées dans les composées organique	61
<b>Figure 6</b> : Structure de $\beta$ -Carotène	62
<b>Figure 7</b> : Montage schématique d'un spectromètre dispersif (à réseau de diffraction) et d'un spectromètre à transformée de Fourier (à droite)	70
<b>Figure 8</b> : Le solvant utilisé absorbe lui-même dans les régions grisées	73
<b>Figure 9</b> : Le spectre infrarouge de l'acide acétique	74
<b>Figure 10</b> : Niveau énergétique d'un proton dans un champ magnétique $B_0$	90
<b>Figure 11</b> : a-spectre de RMN- $^1\text{H}$ de l'acide acétique dans $\text{CDCl}_3$ ; b-spectre de RMN- $^{13}\text{C}$ de l'acide acétique dans $\text{CDCl}_3$	92
<b>Figure 12</b> : Construction schématique d'un spectromètre de RMN	95
<b>Figure 13</b> : Algorithme représente les différentes parties et le mode de fonctionnement de programme	112

<b>Tableau 19</b> : Bandes d'absorptions des composés aromatiques (vibration de valence C=C)	86
<b>Tableau 20</b> : Modèles d'absorptions de substitution des cycles benzéniques	87
<b>Tableau 21</b> : Abondance naturelle de quelques éléments, son isotope et son nombre quantiques	89
<b>Tableau 22</b> : Les valeurs de g présentent des fréquences de résonance de quelques noyaux	91
<b>Tableau 23</b> : Couplage $^1\text{H}, ^1\text{H}$	96
<b>Tableau 24</b> : Déplacement chimique des protons liés à un atome de carbone adjacent à un groupe fonctionnel dans des composés aliphatique	98
<b>Tableau 25</b> : Déplacement chimique des protons sur les cycles benzéniques monosubstitués	100
<b>Tableau 26</b> : Les enregistrements concernant les absorptions des protons des liaisons (C=C)	101
<b>Tableau 27</b> : Déplacements chimiques des protons des groupements OH, NH (valeur de $\delta$ mesurées dans $\text{CDCl}_3$ )	103
<b>Tableau 28</b> : Déplacement $^{13}\text{C}$ des classes chimiques	106
<b>Tableau 29</b> : déplacements chimiques des cycloalcanes (en ppm par rapport au TMS)	107
<b>Tableau 30</b> : déplacements chimiques des alcynes (en ppm)	108
<b>Tableau 31</b> : Positions des déplacements des amines acycliques (pur, en ppm par rapport au TMS)	109
<b>Tableau 32</b> : la base de données réalisées dans le programme pour déterminer la formule brute du composé analysé	110
<b>Tableau 33</b> : La base de données réalisée pour déterminer la structure imputée des principaux fragments	173
<b>Tableau 34</b> : La base de données réalisée dans le programme pour calculer les groupes fonctionnels du composé analysé	177
<b>Tableau 35</b> : La base de données utilisée dans le programme pour déterminer le proton d'un groupe responsable de résonance	179
<b>Tableau 36</b> : la base réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes de carbone	181

# *Introduction Générale*

## **Introduction générale**

L'identification courante et l'interprétation spectre par spectre des composés organiques à partir des informations fournies par les méthodes spectroscopiques : la masse, l'ultra violet, l'infrarouge et la résonance magnétique nucléaire, est un processus traditionnelle du point de vue temps, basé sur des tables et des spectres connus pour chaque méthode pour faciliter la résolution des problèmes.

La spectrométrie de masse (SM) désigne une méthode d'analyse destructif qui repose sur la détermination de masses des espèces atomique ou moléculaires individuelles d'échantillon analysée, ce qui permet de recueillir des informations sur sa structure a partir de la reconnaissance de pic moléculaire, l'abondance isotopique M+1 et M+2. On utilise comme base de données la table de J. H. Beynom qui reprend les formules correspondantes soit des molécules, soit des fragments dont la masse est comprise entre 12 à 250 et son abondance isotopique.

La spectrométrie ultra violet (UV) est désignée par UV/ visible, donne des informations sur l'insaturation (le nombre de double bonde équivalente DBE) de la structure recherchée ainsi la capacité de la spectrométrie UV/visible a donnée une réponse rapide aux questions concernant la délocalisation électronique, a joué en faveur de son maintien. Dans ce cas, chaque transition électronique correspondant une longueur d'onde bien déterminer, par exemple pour les chromophore éthylénique l'absorption de la transition  $n \rightarrow \pi^*$  vers 165 nm. Il existe des tables qui donnent la longueur d'onde pour chaque transition électronique et leur chromophore correspondant.

La spectrométrie infrarouge (IR) est une méthode de dosage non destructif basée sur l'absorption. Une molécule très simple peut donner un spectre extrêmement complexe. Le chimiste organicien tire avantage de cette complexité quant il compare le spectre d'un composé inconnu avec celui d'un échantillon connu. Une corrélation pic par pic est un

excellent moyen d'identification. Bien que le spectre infrarouge soit caractéristique et individuel de la molécule entière

Il existe des tables qui contiennent des absorptions des bandes caractéristiques, qui permet d'obtenir des informations utiles sur la structure par simple comparaison avec celui-ci et sur les quelles nous nous baserons, par exemple le groupe carbonyle absorbe très intense vers  $1720$  à  $1800\text{ cm}^{-1}$  quelque soit le composé étudié.

La résonance magnétique nucléaire (RMN) est à l'origine d'une méthode utile pour résoudre les problèmes de détermination de structure des composés organiques. Elle est utilisée en complément des méthodes de spectroscopie optique et de la spectrométrie de masse, elle permet de préciser la formule développée.

Le spectre RMN correspond à l'absorption, par certains atomes de l'échantillon, de certaines fréquences présentes dans la source électromagnétique. L'interprétation de ces signaux (position, aspect, intensité) conduit à un ensemble d'information d'où l'on déduit des détails sur la structure concernant l'échantillon.

Le but de ce travail est l'élaboration d'un programme de calcul des propriétés spectroscopiques des composés organiques, ce programme basé sur les résultats obtenus de chaque méthode spectroscopique (SM, UV/visible, IF, RMN). A partir de données spectrales on détermine les principales caractéristiques concernant le composé considéré, tel que la masse moléculaire, les principaux fragments, les groupes fonctionnels, le nombre et la nature de transitions et le chromophore qui supporte le proton responsable sur le déplacement chimique ainsi que le carbone.

Le programme réalisé utilise le langage Fortran 90 version 5, il est constitué de plusieurs bases de données chacune correspond à une méthode d'analyse.

Les recherches dans ce sens sont effectivement rares et modestes, car le couplage des informations tirées par les quatre méthodes spectroscopiques c'est un travail très complexe et demande plusieurs recherches supplémentaires.

# *PARTIE THEORIQUE*



# *Chapitre I*

## *Spectrométrie de Masse*

## Chapitre I. Spectrométrie de masse

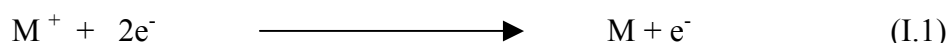
### I.1 Introduction

La spectrométrie de masse (SM) désigne une méthode d'analyse qui repose sur la détermination des masses des espèces atomiques ou moléculaires individuelles de l'échantillon analysé, ce qui permet de recueillir des informations sur sa nature, sa composition et même sur sa structure [1]. Cette méthode détruit le composé analysé, et occupe une place privilégiée grâce à ces caractéristiques [2] : sensibilité et limite de détection inégalées,

Elle joue aujourd'hui un rôle crucial dans les études de pollution de l'environnement du fait de sa sensibilité, de sa sélectivité et de sa capacité d'analyses quantitative rapide [3-4].

### I.2 Principe

Dans le mode à impacte électronique (EI) utilisé couramment, un spectromètre de masse bombarde des molécules en phase gazeuses avec un faisceau d'électrons de haute énergie et enregistre le résultat des impacts d'électron sous la forme d'un spectre d'ion positifs séparés sur base du rapport masse/charge ( $m/z$ ) [4]. La plupart de ces ions portant une charge positive unitaire. Par exemple par impact électronique :



Cet ion moléculaire va se fragmenter. On remarquera qu'il s'agit d'un radical cation, à nombre impair d'électrons. Il pourra donner comme fragment soit un radical et un ion à nombre pair d'électrons, soit une molécule et un nouveau radical cation [3].

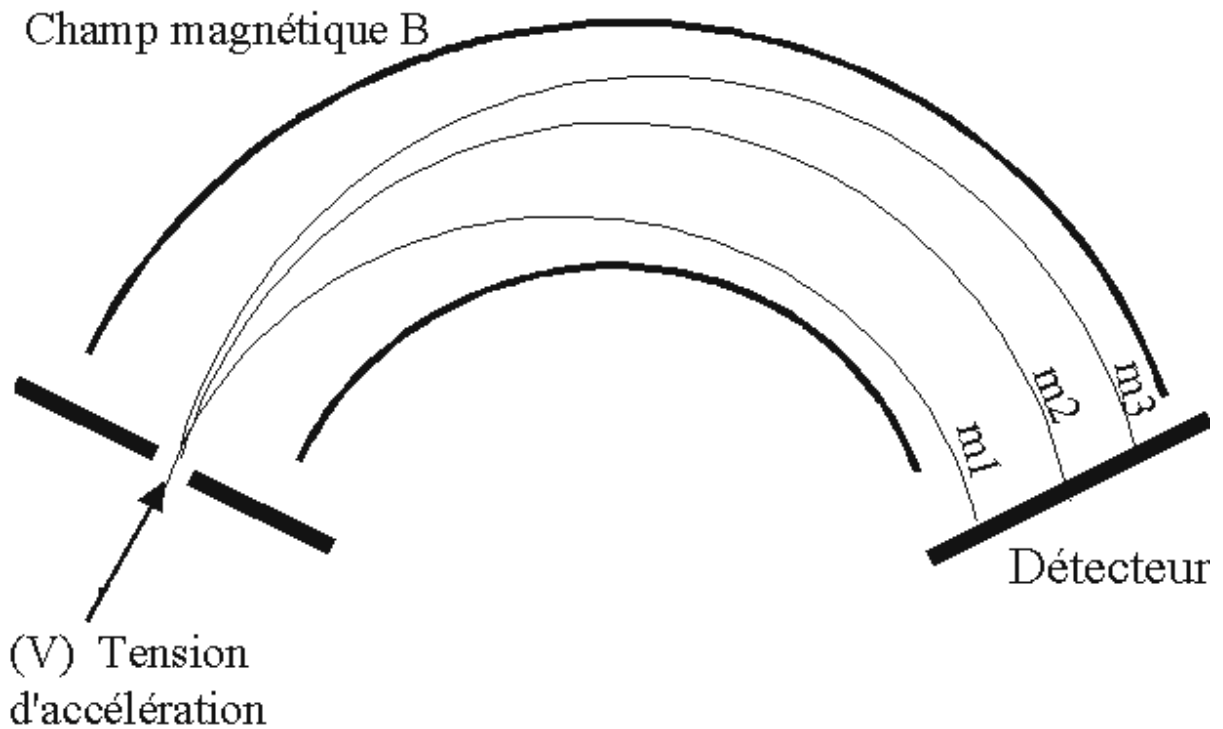
Chacun des ions primaires, obtenues à partir de l'ion moléculaire, peut à son tour fragmenter, et ainsi de suite.

Les ions ainsi obtenus sont en suite séparés d'après leur masse, et détectés en production de leur nombre. On obtient ainsi le spectre de la molécule.

Le spectre de masse est représenté sous forme d'un histogramme dessiné par ordinateur, représentant l'abondance (intensité verticale du pic) en fonction de  $m/z$  (sous formes graphique et tubulaire)[4].

- L'équation fondamentale de la spectrométrie de masse:

Une particule chargée dans un champ magnétique possède la propriété suivante :

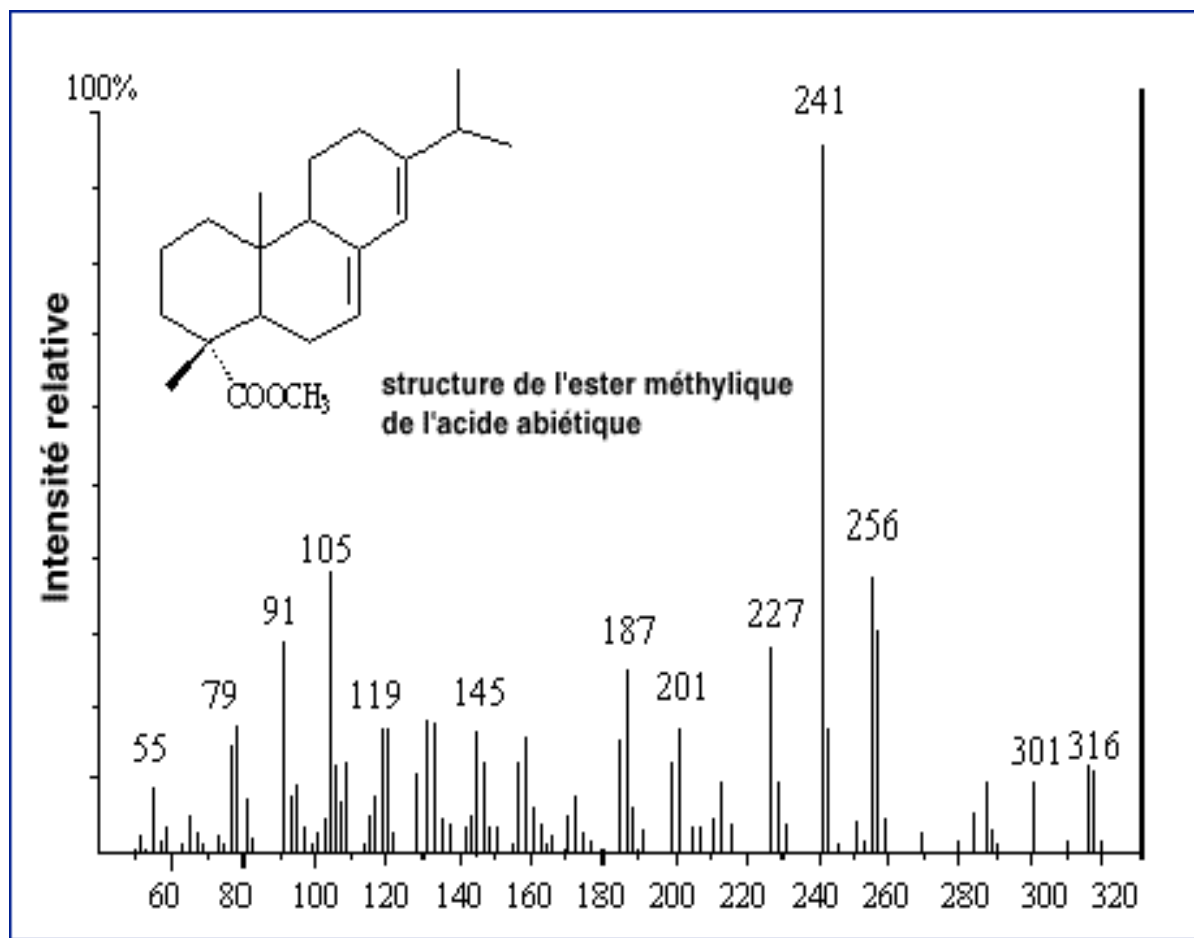


**Figure 1** : Séparation des masses

$$\frac{m}{Z} = \frac{B^2 r^2}{2V} \quad (I.2)$$

Où B est la valeur du champ magnétique, r le rayon de la trajectoire, et V la différence de potentiel appliqué à la charge. En faisant varier la valeur du champ B ou la valeur du potentiel V on peut détecter toutes les masses de fragment produit par l'ionisation [6].

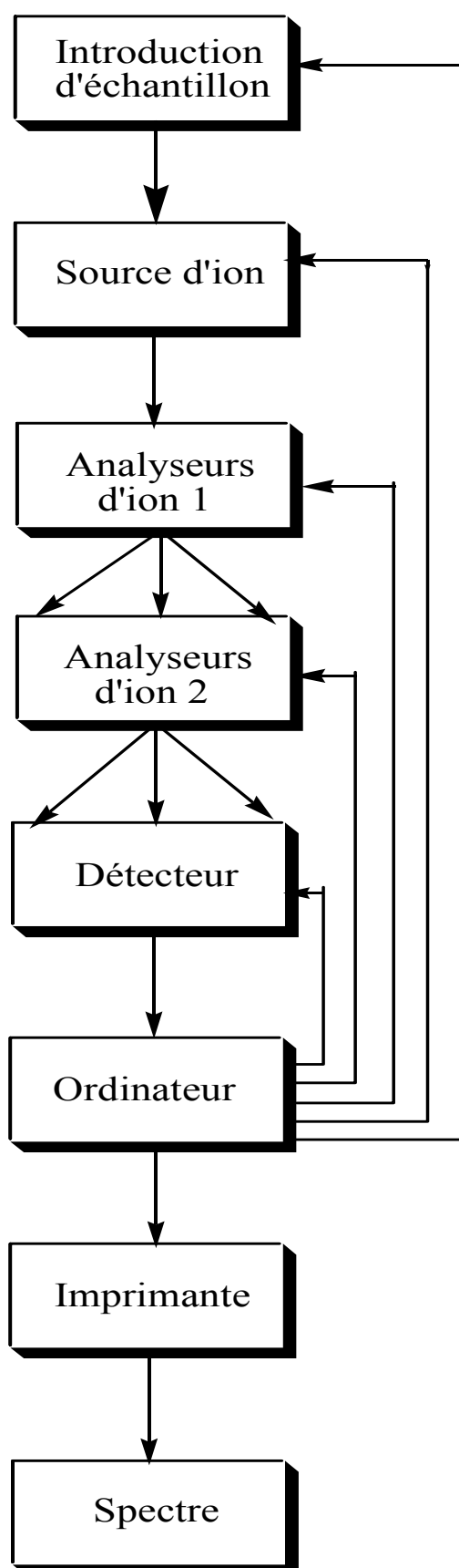
En utilisant un spectromètre de masse haute résolution nous pouvons également déterminer la masse exacte du composé et déterminer les pourcentages isotopiques de chaque atome. Avec une telle précision la détermination de la composition élémentaire du composé est quasiment assurée.



**Figure 2:** le spectre de masse de l'ester méthylique de l'acide acétique en impact électronique

### I.3 Instrumentation

Un spectromètre de masse se compose d'une source d'ion, d'un accélérateur, d'un appareil capable de différencier les masses et de les séparer dans l'espace, et d'un détecteur [5-7].



**Figure 3** : Schéma de principe d'un spectromètre à deux analyseurs et contrôle en feedback par l'ordinateur

### I.3.1 Introduction des échantillons dans la source

Le spectromètre de masse organique est une méthode d'analyse en phase gazeuse [7]. Le mode d'introduction de l'échantillon dans la source doit donc assurer le changement d'état physique du composé. Cette volatilisation constitue une limitation principale de la spectrométrie de masse aux composés ayant une tension de vapeur suffisante, à la température et à la pression de la source [5-8].

Il existe trois modes d'introduction des échantillons : l'entrée chauffante (réservoir), l'entrée directe (probe) et le chromatographe (en phase gazeuse ou liquide).

### I.3.2 Mode d'ionisation en spectrométrie de masse

Il existe diverses méthodes pour ioniser un composé sous vide. Dans l'optique du couplage avec les techniques chromatographiques, seules désorption de champ et la technique FAB (Fast Atom Bombardement), l'impact électronique et l'ionisation chimiques [8]. Ces deux dernières modes d'ionisations donnent effectivement des résultats complémentaires [9].

- **Impact électronique**

Cette source inventée par Dempster et perfectionnée par Bleakney et par Nier est la plus courante en spectrométrie de masse organique, elle est constituée d'un filament chauffé qui émet les électrons. Ceux-ci sont accélérés vers une anode, et entrent en collision avec les molécules gazeuses de la source [8].

- **Ionisation chimique**

Dans ce mode d'ionisation, les ions sont formés par des réactions de transfert de charges ou transfert de protons  $H^+$  en fonction de la nature du gaz utilisé [5-6]. Ces réactions se produisent en phase gazeuse entre les ions d'un gaz réactif à haute pression (0,2 à 2 torr) et les molécules non chargées du composé à analyser.

**Tableau 1 :** quelques gaz réactionnels utilisés en ionisation chimique

	Affinité Protonique (Kcal/mol)	Composition du courant ionique	m/z	Abondance (%)	Pression (torr)
H <sub>2</sub>	100	H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	3	-	0.7-1.0
CH <sub>4</sub>	127	CH <sub>5</sub> <sup>+</sup> C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup> C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup>	17 29 43	47 41 6	0.5-2.0
H <sub>2</sub> O	165	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> (H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	19		0.25
NH <sub>3</sub>	207	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> NH <sub>3</sub> NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> (NH <sub>3</sub> ) <sub>n</sub> NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	18 35	97 3	0.5-1.0

- **Bombardement d'atomes rapides (FAB)**

C'est une méthode d'ionisation pour les molécule organiques qu'il est difficile, voir impossible, de vaporiser. Le principe de la méthode consiste en l'envoi d'atomes neutres rapide sur un mince film de l'échantillon dans la source d'ionisation du spectromètre de masse. Les ions simples ainsi produits sont accélérés, focalisés et finalement analysés avec l'instrumentation optique habituelle [6].

### I.3.3 Séparation des ions et Analyse des rapports m/z

L'analyseur constitue le cœur du spectromètre de masse, son monochromateur. C'est dans ce tube analyseur que s'effectue la séparation des différentes espèces ioniques en fonction de leur rapport m/z[5]. Parmi les analyseurs utilisés, deux types largement utilisés : Le secteur magnétique et le filtre quadripolaire [6].

### I.3.4 Les détecteurs

Le faisceau d'ion, ayant traversé l'analyseur de masse, doit être détecté et transformé en un signal utilisable. Pour ce faire, il existe différents types de détecteurs capables de transformer un courant ionique faible en un signal mesurable [5-7]. La plaque photographique et les cylindres de Faraday permettent une mesure directe des charges arrivant au détecteur tandis que les détecteurs multiplicateurs d'électrons ou de photons et les détecteurs à microcanaux permettent l'augmentation de l'intensité du signal détecté [5].

### I.4 Ion moléculaire et détermination de la formule du composé organique

Mise à part quelque exception, le signal ayant la plus grande masse correspond au pic de l'ion moléculaire.

Une formule moléculaire unique (ou celle d'un fragment) peut souvent être obtenue à partir d'une mesure de la masse suffisamment précise [7]. Cela est possible parce que les masses atomiques ne sont pas des nombres entiers. Par exemple, pour une masse nominale de 28, nous pouvons distinguer entre CO, N<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>N et C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Ainsi, la masse observée pour l'ion moléculaire du CO est la somme des masses exactes de l'isotope le plus abondant du carbone et de l'oxygène, somme qui est différente du poids moléculaire du CO basé sur les masses atomiques qui sont une moyenne des masses de tous les isotopes naturels d'un élément (par exemple, C=12.01 ; O=15.999)[6]. C'est une tâche fastidieuse que de trouver la formule moléculaire par des approximations arithmétiques successives. A la fin de ce chapitre, des tables, nommées tables de J.H.Beynon (le pourcentage de l'isotope M+1 et M+2 est calculé à partir l'équation I.7, I.8), a reprend les formules qui correspondent soit à des molécules, soit à des fragment dont la masse est comprise entre 12 et 250[7]. Est prise pour chacun, la masse exacte de la formule. Cette masse est obtenue en additionnant la masse exacte (table 2) de l'isotope le plus abondant de chaque élément [6]. La masse de l'ion moléculaire est la somme des masses des isotopes les plus abondants (c'est-à-dire <sup>12</sup>C, <sup>1</sup>H, <sup>16</sup>O, etc....) dans la molécule. Le tableau 2 reprend les principaux isotopes stables de éléments courant ainsi que leur abondance relative calculée sur base de 100 molécules contenant les isotopes les répandus [6-9-8]. Supposons qu'un composé contient un atome de carbone. Donc, pour 100 molécules contenant un atome de <sup>12</sup>C, environ 1.11 "molécules" contiennent un atome de <sup>13</sup>C et ces molécules donneront un pic M+1 dont l'intensité représentera environ 1.1% de celle de pic moléculaire. Les atomes <sup>2</sup>H présent apporteront leur très faible contribution au pic M+1. Si un composé contient un atome de soufre, le pic M+2 représentera environ 4.4% du pic moléculaire [7]. S'il n'y a que C, H, N, O, F, P, I qui sont présents, les intensités



approximatives attendues en pourcentage (%) en M+1 et des M+2 sont calculées en utilisant les formules suivantes [7] :

$$\%(M+1) = 100 \left[ \frac{(M+1)}{M} \right] = 1.1 \times \text{nombre d'atomes C} + 0.36 \times \text{nombre d'atomes N} \quad (I.3)$$

$$\%(M+2) = 100 \left[ \frac{(M+2)}{M} \right] = \frac{(1.1 \times \text{nombre d'atomes C})^2}{200} + 0.20 \times \text{nombre d'atomes O} \quad (I.4)$$

Ces équations sont utiles pour les cas où nous avons une hypothèse quant à la formule moléculaire du composé qui nous intéresse. Pour utiliser les données M+1 et M+2, la partie significative du spectre doit être balayée lentement pour des échantillons très purs et le résultat de plusieurs balayages doit être moyenné[6].

**Tableau 2** : Abondances relatives des isotopes d'éléments courants

Élément	Isotope	Abondance relative	Isotope	Abondance relative	Isotope	Abondance relative
Carbone	<sup>12</sup> C	100	<sup>13</sup> C	1.11		
Hydrogène	<sup>1</sup> H	100	<sup>2</sup> H	0.016		
Azote	<sup>14</sup> N	100	<sup>15</sup> N	0.38		
Oxygène	<sup>16</sup> O	100	<sup>17</sup> O	0.04	<sup>18</sup> O	0.20
Fluor	<sup>19</sup> F	100				
Silicium	<sup>28</sup> Si	100	<sup>29</sup> Si	5.10	<sup>30</sup> Si	3.3
Phosphore	<sup>31</sup> P	100				
Soufre	<sup>32</sup> S	100	<sup>33</sup> S	0.78	<sup>34</sup> S	4.40
Chlore	<sup>35</sup> Cl	100			<sup>37</sup> Cl	32.5
Brome	<sup>79</sup> Br	100			<sup>81</sup> Br	98.0
Iode	<sup>127</sup> I	100				

### I.5 Principales réactions de fragmentation des molécules organique

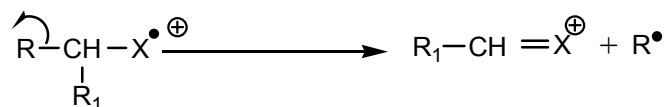
Sur le spectre de masse des ions de masse inférieur au pic parent vont apparaître. Il s'agit de structures obtenues par fragmentation.

#### Cas des alcanes

Il sont peut intéressant. Il donnent surtout des cations éthyl, propyl, butyl et pentyl, quel que soit l'alcane étudié [6-12].

#### Cas des dérivés de type R-CR'R"-X, où X est OH, NH<sub>2</sub>

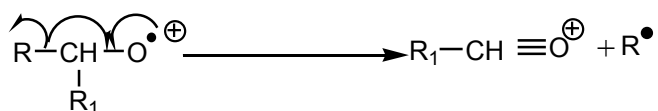
Il y a de rupture de la liaison en alpha du OH :



Puis la fragmentation de R' ramène aux résultats obtenus pour les alcanes.

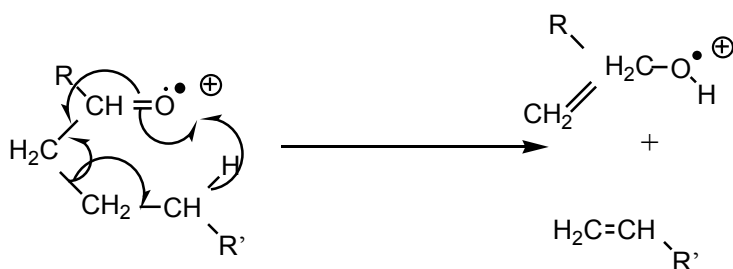
#### Cas des dérivés carbonylés

Il y a également rupture en alpha de la fonction carbonyle

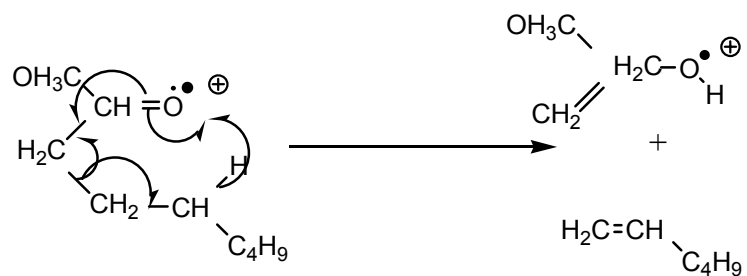


On obtient des pics à 43 (CH<sub>3</sub>-C≡O), 57, 71...

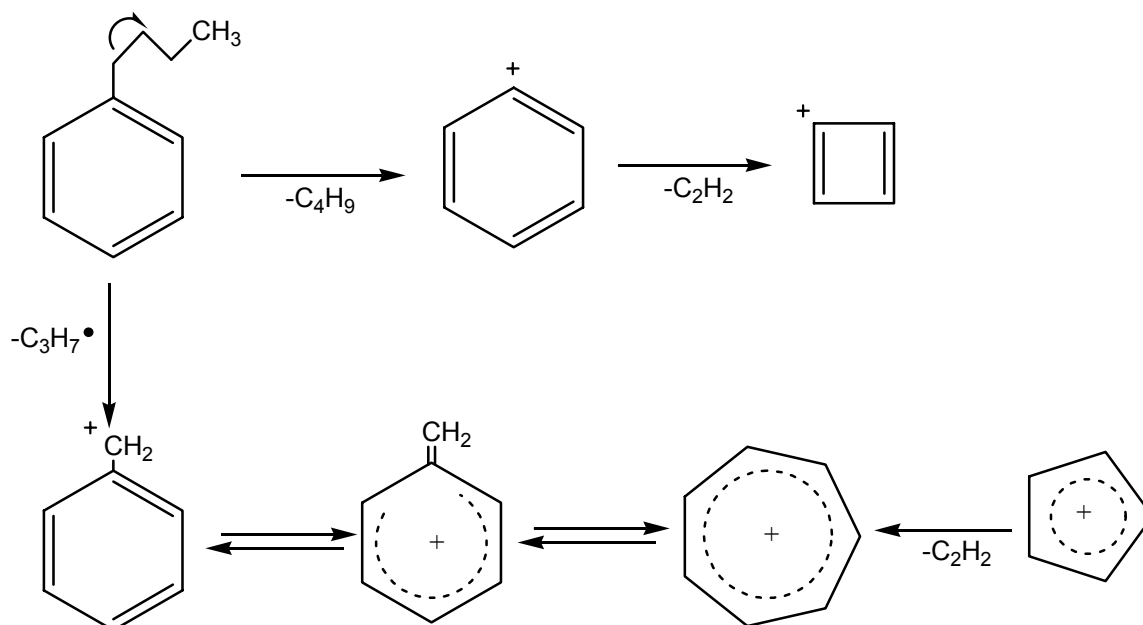
Le réarrangement de Mc Lafferty se rencontre pour le dérivés carbonylé (ou les esters) :

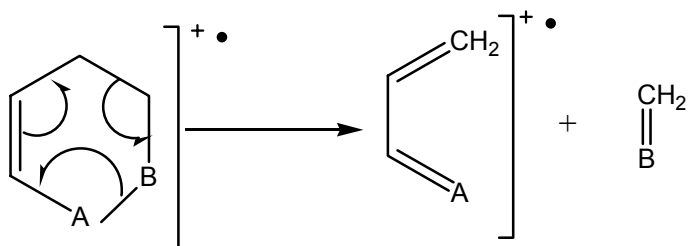
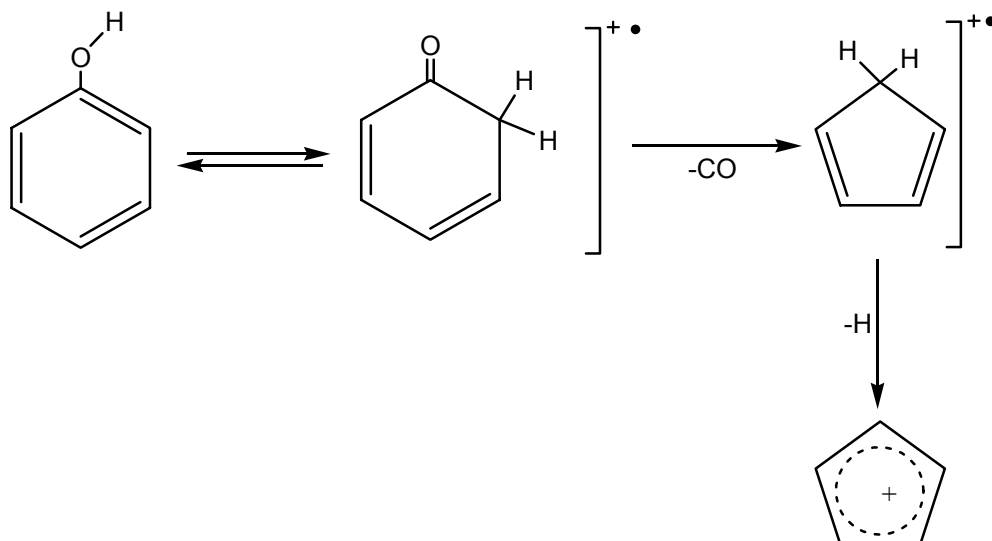


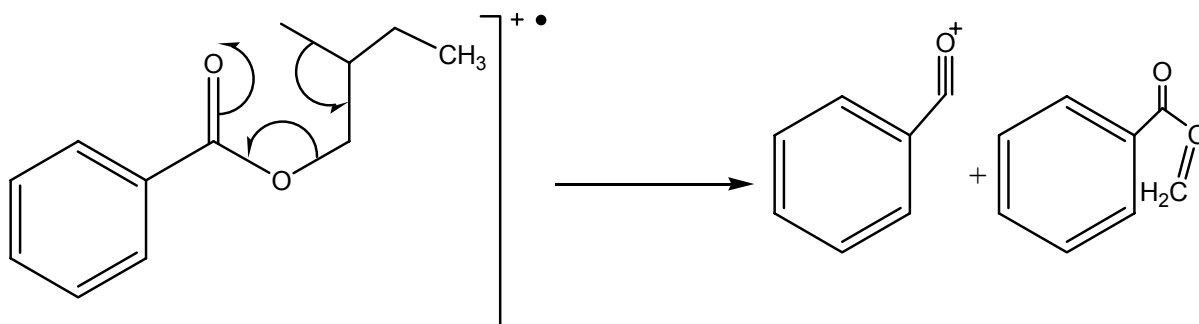
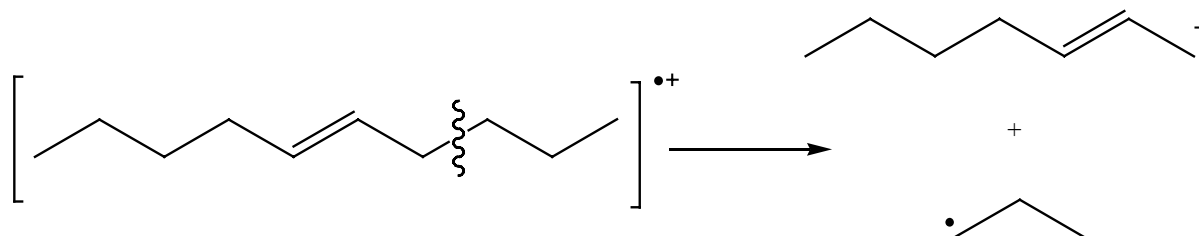
Ainsi, l'octanoate de méthyle donnera-t-il un pic de base à 74 :



### Fragmentation benzylique



**Rétro réaction Diels-Alder (RDA)****Perte de CO**

**Réaction onium****Fragmentation allylique**

**Tableau 3** : Masses et rapport d'abondance isotopique pour diverses combinaisons de carbone, d'hydrogène et d'azote

M	M+1	M+2	M	M+1	M+2	M	M+1	M+2
C	1.08	0	33			C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	2.29	0.21
13			HO <sub>2</sub>	0.09	0.4	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N	2.65	0.02
CH	1.1	0	H <sub>3</sub> NO	0.47	0.2	46		
14			34			NO <sub>2</sub>	0.46	0.4
N	0.38	0	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.11	0.4	H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	0.83	0.2
CH <sub>2</sub>	1.11	0	36			H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	1.21	0.01
15			C <sub>3</sub>	3.24	0.04	CH <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.19	0.4
NH	0.4	0	37			CH <sub>4</sub> NO	1.57	0.21
CH <sub>3</sub>	1.13	0	C <sub>3</sub> H	3.26	0.04	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	1.94	0.01
16			38			C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	2.3	0.22
O	0.04	0.2	C <sub>2</sub> N	2.54	0.02	47		
H <sub>2</sub> N	0.41	0	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub>	3.27	0.04	HNO <sub>2</sub>	0.48	0.4
CH <sub>4</sub>	1.14	0	39			H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	0.85	0.2
17			C <sub>2</sub> HN	2.56	0.02	H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	1.22	0.01
HO	0.06	0.2	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	3.29	0.04	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.21	0.4
H <sub>3</sub> N	0.43	0	40			CH <sub>5</sub> NO	1.58	0.21
18			CN <sub>2</sub>	1.84	0.01	48		
H <sub>2</sub> O	0.07	0.2	C <sub>2</sub> O	2.2	0.21	O <sub>3</sub>	0.12	0.6
24			C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N	2.57	0.02	H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	0.49	0.4
C <sub>2</sub>	2.16	0.01	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	3.31	0.04	H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	0.96	0.2
25			41			CH <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.22	0.4
C <sub>2</sub> H	2.18	0.01	CHN <sub>2</sub>	1.86	0.01	C <sub>4</sub>	4.32	0.07
26			C <sub>2</sub> HO	2.22	0.21	49		
CN	1.46	0	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	2.59	0.02	HO <sub>3</sub>	0.13	0.6
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2.19	0.01	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub>	3.32	0.04	H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	0.51	0.4
27			42			C <sub>4</sub> H	4.34	0.07
CHN	1.48	0	N <sub>3</sub>	1.14	0	50		
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	2.21	0.01	CNO	1.5	0.21	H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.15	0.6
28			CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	1.88	0.01	C <sub>3</sub> N	3.62	0.05
N <sub>2</sub>	0.76	0	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	2.23	0.21	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub>	4.35	0.05
CO	1.12	0.2	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N	2.61	0.02	51		
CH <sub>2</sub> N	1.49	0	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	3.34	0.04	C <sub>3</sub> HN	3.64	0.05
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2.23	0.01	43			C <sub>4</sub> H <sub>3</sub>	4.37	0.07
29			HN <sub>3</sub>	1.16	0	52		
HN <sub>2</sub>	0.78	0	CHNO	1.52	0.21	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2.92	0.03
CHO	1.14	0.2	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	1.89	0.01	C <sub>3</sub> O	3.28	0.24
CH <sub>3</sub> N	1.51	0	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O	2.25	0.21	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O	3.66	0.05
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	2.24	0.01	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N	2.62	0.2	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub>	4.39	0.07
30			C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	3.35	0.04	53		
NO	0.42	0.2	44			C <sub>2</sub> HN <sub>2</sub>	2.94	0.03
H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	0.79	0	N <sub>2</sub> O	0.8	0.2	C <sub>3</sub> HO	3.3	0.24
CH <sub>2</sub> O	1.15	0.2	H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	1.18	0	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	3.67	0.05
CH <sub>4</sub> N	1.53	0.01	CO <sub>2</sub>	1.16	0.4	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub>	4.4	0.07
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	2.26	0.01	CH <sub>2</sub> NO	1.53	0.21	54		
31			CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	1.91	0.01	CN <sub>3</sub>	2.22	0.02
HNO	0.44	0.2	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	2.26	0.21	C <sub>2</sub> NO	2.58	0.22
H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	0.81	0	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N	2.64	0.02	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	2.96	0.03
CH <sub>3</sub> O	1.17	0.2	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	3.37	0.04	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O	3.31	0.24
CH <sub>5</sub> N	1.54	0.01	45			C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N	3.69	0.05
32			HN <sub>2</sub> O	0.82	0.2	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	4.42	0.07
O <sub>2</sub>	0.08	0.4	H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	1.19	0	55		
H <sub>2</sub> NO	0.45	0.2	CHO <sub>2</sub>	1.17	0.4	CHN <sub>3</sub>	2.24	0.02
H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	0.83	0	CH <sub>3</sub> NO	1.55	0.21	C <sub>2</sub> HNO	2.6	0.22
CH <sub>4</sub> O	1.18	0.2	CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	1.92	0.01	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	2.97	0.03

C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.3	0.42	C <sub>3</sub> NO	3.66	0.25	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N	4.85	0.09
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NO	2.68	0.22	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	4.04	0.06	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub>	5.58	0.13
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	3.05	0.03	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O	4.39	0.27	72		
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	3.41	0.24	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N	4.77	0.09	N <sub>4</sub> O	1.56	0.21
C <sub>5</sub>	5.4	0.12	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	5.5	0.12	CN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.92	0.41
61			67			CH <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	2.3	0.22
HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.86	0.4	C <sub>2</sub> HN <sub>3</sub>	3.32	0.04	CH <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	2.67	0.03
H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	1.23	0.21	C <sub>3</sub> HNO	3.68	0.25	C <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.28	0.62
H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	1.61	0.01	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	4.05	0.06	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	2.65	0.42
CHO <sub>3</sub>	1.22	0.6	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O	4.41	0.27	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	3.03	0.23
CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	1.59	0.41	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N	4.78	0.09	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	3.4	0.04
CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	1.96	0.21	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub>	5.52	0.12	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.38	0.44
CH <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	2.34	0.02	68			C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> NO	3.76	0.25
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	2.32	0.42	CN <sub>4</sub>	2.61	0.03	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	4.13	0.07
C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO	2.69	0.22	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	2.96	0.23	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O	4.49	0.28
C <sub>5</sub> H	5.42	0.12	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	3.34	0.04	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N	4.86	0.09
62			C <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.32	0.44	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	5.6	0.13
NO <sub>3</sub>	0.5	0.6	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> NO	3.69	0.25	C <sub>6</sub>	4.48	0.18
H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.87	0.4	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	4.07	0.06	73		
H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	1.25	0.21	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O	4.43	0.28	HN <sub>4</sub> O	1.58	0.21
H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	1.62	0.01	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N	4.8	0.09	CHN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.94	0.41
CH <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.23	0.6	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub>	5.53	0.12	CH <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	2.31	0.22
CH <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	1.6	0.41	69			CH <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	2.69	0.03
CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	1.98	0.21	CHN <sub>4</sub>	2.62	0.03	C <sub>2</sub> HO <sub>3</sub>	2.29	0.62
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	2.34	0.42	C <sub>2</sub> HN <sub>2</sub> O	2.98	0.23	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	2.67	0.42
C <sub>4</sub> N	4.7	0.09	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	3.35	0.04	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	3.04	0.23
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub>	5.44	0.12	C <sub>3</sub> HO <sub>2</sub>	3.34		C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	3.42	0.04
63			C <sub>3</sub> H <sub>3</sub>	3.71	0.25	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	3.4	0.44
HNO <sub>3</sub>	0.51	0.6	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	4.08	0.06	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO	3.77	0.25
H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.89	0.4	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O	4.44	0.28	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	4.15	0.07
H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	1.26	0.21	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N	4.82	0.09	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O	4.51	0.28
CH <sub>3</sub> O <sub>8</sub>	1.25	0.6	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub>	5.55	0.12	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N	4.88	0.09
CH <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	1.62	0.41	70			C <sub>6</sub> H	6.5	0.18
C <sub>4</sub> HN	4.72	0.09	CN <sub>3</sub> O	2.26	0.22	74		
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub>	5.45	0.12	CH <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	2.64	0.03	N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.22	0.41
64			C <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	2.62	0.42	H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	1.6	0.21
O <sub>4</sub>	0.16	0.8	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	3	0.23	CNO <sub>3</sub>	1.58	0.61
H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	0.53	0.6	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	3.37	0.04	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.95	0.41
H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.91	0.4	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.35	0.44	CH <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	2.33	0.22
CH <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	1.26	0.6	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> NO	3.73	0.25	CH <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	2.7	0.03
C <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	4	0.06	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	4.1	0.07	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.31	0.62
C <sub>4</sub> O	4.36	0.27	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O	4.46	0.28	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	2.68	0.42
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N	4.74	0.09	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N	4.83	0.09	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	3.06	0.23
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub>	5.47	0.12	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	5.56	0.13	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	3.43	0.05
65			71			C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	3.42	0.44
HO <sub>4</sub>	0.17	0.8	CHNO <sub>3</sub>	2.28	0.22	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> NO	3.79	0.25
H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	0.55	0.6	CH <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	2.65	0.03	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	4.16	0.07
C <sub>3</sub> HN <sub>2</sub>	4.02	0.6	C <sub>2</sub> HNO <sub>2</sub>	2.64	0.42	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> O	4.52	0.28
C <sub>4</sub> HO	4.38	0.27	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	3.01	0.23	C <sub>5</sub> N	5.78	0.14
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N	4.75	0.9	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	3.39	0.04	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub>	6.52	0.18
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub>	5.48	0.12	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.37	0.44	75		
66			C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO	3.74	0.25	HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.24	0.41
H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.19	0.8	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	4.12	0.07	H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	1.61	0.21
C <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	3.31	0.04	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O	4.47	0.28	CHNO <sub>3</sub>	1.6	0.61
			C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N	4.85	0.09			

CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.97	0.41	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> O	5.47	0.32	C <sub>3</sub> HNO <sub>2</sub>	3.72	0.45
CH <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	2.34	0.22	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N	5.85	0.14	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	4.09	0.27
CH <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	2.72	0.03	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	6.58	0.18	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	4.47	0.08
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.33	0.62	79			C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.45	0.48
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	2.7	0.43	HNO <sub>4</sub>	0.55	0.8	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NO	4.82	0.22
C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	3.08	0.23	H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.93	0.6	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	5.2	0.11
C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	3.45	0.05	H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.3	0.41	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> O	5.55	0.33
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	3.43	0.44	CH <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	1.28	0.8	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N	5.93	0.15
C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO	3.81	0.25	CH <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	1.66	0.61	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>	6.66	0.19
C <sub>5</sub> HN	5.8	0.14	C <sub>3</sub> HN <sub>3</sub>	1.4	0.08	84		
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub>	8.53	0.18	C <sub>4</sub> HNO	4.76	0.29	CN <sub>4</sub> O	2.65	0.23
76			C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	5.13	0.11	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3	0.43
N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.88	0.6	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> O	5.49	0.32	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	3.38	0.24
H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.25	0.41	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	5.86	0.14	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	3.75	0.06
H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	1.63	0.21	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub>	6.6	0.18	C <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.36	0.64
CO <sub>4</sub>	1.24	0.8	80			C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	3.73	0.45
CH <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	1.61	0.61	H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	0.57	0.8	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	4.11	0.27
CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.99	0.41	H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.94	0.6	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	4.48	0.08
CH <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	2.36	0.22	CH <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	1.3	0.8	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.46	0.48
CH <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	2.73	0.03	C <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	3.29	0.05	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> NO	4.84	0.29
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	2.34	0.62	C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	4.04	0.26	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	5.21	0.11
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	2.72	0.43	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	4.42	0.08	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O	5.57	0.33
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	3.09	0.24	C <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.4	0.47	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N	5.94	0.15
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	3.45	0.44	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> NO	4.77	0.29	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	6.68	0.19
C <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	5.09	0.1	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	5.15	0.11	C <sub>7</sub>	7.56	0.25
C <sub>5</sub> O	5.44	0.32	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O	5.51	0.32	85		
C <sub>5</sub> NH <sub>2</sub>	5.82	0.14	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N	5.88	0.14	CHN <sub>4</sub> O	2.66	0.23
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	6.55	0.18	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub>	6.61	0.18	C <sub>2</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.02	0.43
77			81			C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	3.39	0.24
HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.9	0.6	H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	0.59	0.8	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	3.77	0.06
H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.27	0.41	C <sub>2</sub> HN <sub>4</sub>	3.7	0.05	C <sub>3</sub> HO <sub>3</sub>	3.38	0.64
H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	1.64	0.21	C <sub>3</sub> HN <sub>2</sub> O	4.06	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	3.75	0.45
CHO <sub>4</sub>	1.25	0.8	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	4.43	0.08	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	4.12	0.27
CH <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	1.63	0.61	C <sub>4</sub> HO <sub>2</sub>	4.42	0.48	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	4.5	0.08
CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	2	0.41	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> NO	4.79	0.29	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	4.48	0.48
CH <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	2.38	0.22	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	5.17	0.11	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NO	4.85	0.29
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	2.36	0.62	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O	5.52	0.32	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	5.23	0.11
C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	2.73	0.43	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N	5.9	0.14	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> O	5.59	0.33
C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub>	5.1	0.11	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub>	6.63	0.18	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N	5.96	0.15
C <sub>5</sub> HO	5.46	0.32	82			C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>	6.69	0.19
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N	5.83	0.14	C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	3.34	0.24	C <sub>7</sub> H	7.58	0.25
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	6.56	0.18	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	3.72	0.05	86		
78			C <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	3.7	0.45	CN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.3	0.42
NO <sub>4</sub>	0.54	0.8	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	4.08	0.26	CH <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	2.68	0.23
H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0.91	0.6	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	4.45	0.08	C <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	2.66	0.62
H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	1.29	0.41	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.43	0.48	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.03	0.43
H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	1.66	0.21	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> NO	4.81	0.29	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	0.41	0.24
CH <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	1.27	0.8	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	5.18	0.11	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	0.78	0.06
CH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	1.64	0.61	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O	5.54	0.32	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.39	0.64
CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	2.02	0.41	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N	5.91	0.14	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	3.77	0.45
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	2.37	0.62	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>	6.64	0.19	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	4.14	0.27
C <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	4.39	0.08	83			C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	4.51	0.08
C <sub>4</sub> NO	4.74	0.29	C <sub>2</sub> HN <sub>3</sub> O	3.36	0.24	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	4.5	0.48
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	5.12	0.11	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	3.74	0.06	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> NO	4.87	0.3



C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	5.25	0.11	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	3.46	0.25	N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.92	0.8
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O	5.6	0.33	C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	3.83	0.06	H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.21	0.61
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N	5.98	0.15	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	3.44	0.64	H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.67	0.41
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	6.71	0.19	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	3.81	0.46	CH <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	1.65	0.81
C <sub>6</sub> N	6.87	0.2	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	4.19	0.27	CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.02	0.61
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub>	7.6	0.25	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	4.56	0.08	CH <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.4	0.42
87			C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	4.54	0.48	CH <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	2.76	0.23
CHN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.32	0.42	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO	4.92	0.3	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	2.38	0.82
CH <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	2.69	0.23	C <sub>5</sub> HN <sub>2</sub>	6.18	0.16	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	2.76	0.63
C <sub>2</sub> HNO <sub>3</sub>	2.68	0.62	C <sub>6</sub> HO	6.54	0.38	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.13	0.44
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.05	0.43	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N	6.91	0.2	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	3.49	0.64
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	3.42	0.25	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub>	7.64	0.25	C <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	4.77	0.09
C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	3.8	0.06	91			C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	5.12	0.31
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.41	0.64	N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.26	0.61	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	5.5	0.13
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	3.78	0.45	H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.64	0.41	C <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	5.48	0.52
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	4.16	4.27	CNO <sub>4</sub>	1.62	0.81	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> NO	5.86	0.34
C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	4.53	0.08	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.99	0.61	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	6.23	0.16
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	4.51	0.48	CH <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.37	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O	6.59	0.38
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO	4.89	0.3	CH <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	2.74	0.23	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N	6.96	0.21
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	5.26	0.11	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.35	0.82	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	7.69	0.25
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> O	5.62	0.33	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	2.72	0.63	93		
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N	5.99	0.15	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.1	0.44	HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.94	0.8
C <sub>6</sub> HN	6.88	0.2	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	3.47	0.25	H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.31	0.61
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub>	7.61	0.25	C <sub>2</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	3.85	0.06	H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.68	0.41
89			C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	3.46	0.64	CH <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	1.67	0.81
N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.6	0.41	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	3.83	0.46	CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.04	0.61
CN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.96	0.61	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	4.2	0.27	CH <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.42	0.42
CH <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.34	0.42	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	4.56	0.48	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	2.4	0.82
CH <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	2.71	0.23	C <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	5.47	0.12	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	2.77	0.63
C <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.32	0.82	C <sub>5</sub> NO	5.82	0.34	C <sub>3</sub> HN <sub>4</sub>	4.78	0.9
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	2.69	0.63	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	6.2	0.16	C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub> O	5.14	0.31
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.07	0.43	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O	6.55	0.38	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	5.51	0.13
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	3.44	0.25	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N	6.93	0.2	C <sub>5</sub> HO <sub>2</sub>	5.5	0.52
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	3.82	0.06	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub>	7.66	0.25	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> NO	5.87	0.34
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	3.42	0.64	92			C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	6.25	0.16
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	3.8	0.45	HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.28	0.61	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O	6.6	0.38
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	4.17	0.27	H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.65	0.41	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N	6.98	0.21
C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	4.55	0.08	CHNO <sub>4</sub>	1.63	0.81	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub>	7.71	0.26
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	4.53	0.48	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.01	0.61	94		
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> NO	4.9	0.3	CH <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.38	0.42	H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.95	0.8
C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	5.28	0.11	CH <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	2.76	0.23	H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.33	0.61
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	5.63	0.33	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	2.37	0.82	H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.7	0.41
C <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	6.17	0.16	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	2.74	0.63	CH <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	1.68	0.81
C <sub>6</sub> O	6.52	0.38	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.11	0.44	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	2.06	0.62
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N	6.9	0.2	C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	3.49	0.25	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	2.41	0.82
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub>	7.63	0.25	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	3.47	0.64	C <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	4.43	0.28
90			C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	3.85	0.46	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	4.8	0.09
HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.62	0.41	C <sub>4</sub> HN <sub>3</sub>	5.48	0.12	C <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	4.78	0.49
CHN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.98	0.61	C <sub>5</sub> HNO	5.84	0.34	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	5.16	0.31
CH <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	2.35	0.42	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	6.21	0.16	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	5.53	0.13
CH <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	2.73	0.23	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> O	6.57	0.38	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.51	0.52
C <sub>2</sub> HO <sub>4</sub>	2.33	0.82	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N	6.95	0.21	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NO	5.89	0.34
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	2.71	0.63	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub>	7.68	0.25	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	6.26	0.17
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	3.08	0.44				C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O	6.62	0.38

C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N	6.99	0.21	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.11	0.47	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	7.82	0.26
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub>	7.72	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	4.49	0.28	C <sub>7</sub> O	7.6	0.45
95			C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	4.86	0.1	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N	7.92	0.28
H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.97	0.81	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.47	0.68	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub>	8.71	0.33
H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	1.34	0.61	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	4.85	0.49	101		
CH <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	1.7	0.81	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	5.22	0.31	CHN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.7	0.43
C <sub>3</sub> HN <sub>3</sub> O	4.44	0.28	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	5.59	0.13	C <sub>2</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.06	0.64
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	4.82	0.1	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	5.58	0.53	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.43	0.45
C <sub>4</sub> HNO <sub>2</sub>	4.8	0.49	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> NO	5.95	0.35	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	3.81	0.26
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	5.17	0.31	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	6.33	0.17	C <sub>3</sub> HO <sub>4</sub>	3.41	0.84
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	5.55	0.13	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O	6.68	0.39	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	3.79	0.65
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.53	0.52	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N	7.06	0.21	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.16	0.47
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> NO	5.9	0.34	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	7.79	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	4.54	0.28
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	6.28	0.17	C <sub>7</sub> N	7.95	0.27	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	4.91	0.1
C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O	6.63	0.39	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub>	8.68	0.33	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	4.52	0.68
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N	7.01	0.21	99			C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	4.89	0.5
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub>	7.74	0.26	C <sub>2</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.4	0.44	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	5.27	0.31
96			C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	3.77	0.26	C <sub>4</sub> HON <sub>3</sub>	5.64	0.13
H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.98	0.81	C <sub>3</sub> HNO <sub>3</sub>	3.76	0.65	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	5.63	0.53
C <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	3.73	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.13	0.47	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO	6	0.35
C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.08	0.47	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	4.51	0.28	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	6.37	0.17
C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	4.46	0.28	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	4.88	0.1	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O	6.73	0.39
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	4.83	0.1	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.49	0.68	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N	7.11	0.22
C <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	4.44	0.6	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	4.86	0.5	C <sub>6</sub> HN <sub>2</sub>	7.26	0.23
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	4.81	0.49	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	5.24	0.31	C <sub>7</sub> HO	7.62	0.45
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	5.19	0.31	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	5.61	0.13	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N	7.99	0.28
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	5.56	0.13	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	5.59	0.53	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub>	8.72	0.33
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	5.55	0.53	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO	5.97	0.35	102		
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> NO	5.92	0.35	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	6.34	0.17	CN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.34	0.62
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	6.29	0.17	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> O	6.7	0.39	CH <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.72	0.43
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O	6.65	0.39	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N	7.07	0.21	C <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	2.7	0.83
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N	7.03	0.21	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>	7.8	0.26	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.07	0.64
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub>	7.76	0.26	C <sub>7</sub> HN	7.96	0.28	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.45	0.45
C <sub>8</sub>	8.64	0.33	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub>	8.69	0.33	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	3.82	0.26
97			100			C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.43	0.84
C <sub>2</sub> HN <sub>4</sub> O	3.74	0.26	CN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.68	0.43	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	3.8	0.66
C <sub>3</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.1	0.47	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.04	0.63	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.18	0.47
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	4.47	0.28	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.42	0.45	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	4.55	0.28
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	4.85	0.1	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	3.79	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	4.93	0.1
C <sub>4</sub> HO <sub>3</sub>	4.46	0.68	C <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	3.4	0.84	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	4.54	0.68
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	4.83	0.49	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	3.77	0.65	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	4.91	0.5
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	5.2	0.31	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.15	0.47	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	5.28	0.32
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	5.58	0.13	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	4.52	0.28	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	5.66	0.13
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	5.56	0.53	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	4.9	0.1	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	5.64	0.53
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO	5.94	0.35	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	4.5	0.68	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> NO	6.02	0.35
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	6.31	0.17	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	4.82	0.5	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	0.39	0.17
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> O	6.67	0.39	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	5.25	0.31	C <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	0.55	0.18
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N	7.04	0.21	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	5.63	0.13	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O	6.75	0.39
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub>	7.77	0.26	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	5.61	0.53	C <sub>6</sub> NO	6.9	0.4
C <sub>8</sub> H	0.66	0.33	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> NO	5.98	0.35	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	7.28	0.23
98			C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	6.36	0.17	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> O	7.64	0.45
C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.38	0.44	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O	6.71	0.39	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N	8.01	0.28
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	3.76	0.26	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N	7.09	0.22	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub>	8.74	0.34
C <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	3.74	0.65	C <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	7.25	0.23	103		

CHN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.36	0.62	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.12	0.64	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	6.63	0.19
CH <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.73	0.43	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.5	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.61	0.58
C <sub>2</sub> HNO <sub>4</sub>	2.72	0.82	C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	3.87	0.26	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO	6.98	0.41
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.09	0.64	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	3.48	0.84	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	7.36	0.23
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	3.46	0.45	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	3.85	0.66	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O	7.72	0.46
C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	3.84	0.26	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.23	0.47	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N	8.09	0.29
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	3.45	0.84	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	4.6	0.29	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub>	8.82	0.34
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	3.82	0.66	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	4.58	0.62	108		
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.19	0.47	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	4.96	0.5	CH <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.06	0.82
C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	4.57	0.29	C <sub>4</sub> HN <sub>4</sub>	5.86	0.15	CH <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.44	0.62
C <sub>3</sub> HON <sub>4</sub>	4.94	0.1	C <sub>5</sub> HN <sub>2</sub> O	6.22	0.36	CH <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.81	0.43
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	4.55	0.68	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	6.6	0.19	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	2.8	0.83
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	4.93	0.5	C <sub>6</sub> HO <sub>2</sub>	6.58	0.58	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.17	0.64
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	5.3	0.32	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> NO	6.95	0.41	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	3.53	0.85
C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	5.67	0.14	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	7.33	0.23	C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	4.81	0.3
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	5.66	0.53	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O	7.68	0.45	C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.16	0.51
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> NO	6.03	0.35	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N	8.06	0.28	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	5.54	0.33
C <sub>5</sub> HN <sub>3</sub>	6.56	0.18	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub>	8.79	0.34	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	5.91	0.15
C <sub>6</sub> HNO	6.92	0.4	106		C <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	5.52	0.72	
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	7.29	0.23	CH <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.03	0.82	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	5.89	0.54
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> O	7.65	0.45	CH <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.41	0.62	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	6.27	0.37
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N	8.03	0.28	CH <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.78	0.43	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	6.64	0.19
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub>	8.76	0.34	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	2.76	0.83	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.63	0.59
104			C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.14	0.64	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NO	7	0.41
CN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2	0.81	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.51	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	7.37	0.24
CH <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.37	0.62	C <sub>2</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	3.89	0.26	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O	7.73	0.46
CH <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.75	0.43	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	3.49	0.85	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N	8.11	0.29
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	2.73	0.83	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	3.87	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub>	8.84	0.34
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.11	0.64	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.24	0.47	C <sub>9</sub>	9.73	0.42
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.48	0.45	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	4.6	0.68	109		
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	3.85	0.26	C <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	5.51	0.33	CH <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.08	0.82
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	3.46	0.84	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	5.88	0.15	CH <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.45	0.62
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	3.84	0.66	C <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	5.86	0.54	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	2.81	0.83
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	4.21	0.47	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	6.24	0.36	C <sub>3</sub> HN <sub>4</sub> O	4.82	0.3
C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	4.59	0.29	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	6.61	0.19	C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.18	0.51
C <sub>3</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	4.96	0.1	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.59	0.58	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	5.55	0.33
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	4.57	0.68	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO	6.97	0.41	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	5.93	0.15
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	4.94	0.5	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	7.34	0.23	C <sub>5</sub> HO <sub>3</sub>	5.54	0.73
C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	5.32	0.32	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O	7.7	0.46	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	5.91	0.55
C <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	5.85	0.14	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N	8.07	0.28	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	6.29	0.37
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	5.67	0.53	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	8.8	0.34	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	6.66	0.19
C <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	6.2	0.36	107		C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	6.64	0.59	
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	6.58	0.19	CH <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.05	0.82	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NO	7.02	0.41
C <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	6.56	0.58	CH <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.42	0.62	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	7.39	0.24
C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> NO	6.94	0.41	CH <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.8	0.43	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> O	7.75	0.46
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	7.31	0.23	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	2.78	0.83	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N	8.12	0.29
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> O	7.67	0.45	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3.15	0.64	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub>	8.85	0.35
C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N	8.04	0.28	C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	3.53	0.45	C <sub>9</sub> H	9.74	0.42
C <sub>8</sub> H <sub>6</sub>	8.77	0.34	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	3.51	0.85	110		
105			C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	3.88	0.66	CH <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.1	0.82
CHN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	2.02	0.81	C <sub>4</sub> HN <sub>3</sub> O	5.52	0.33	C <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.46	0.48
CH <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	2.39	0.62	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	5.9	0.15	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	4.84	0.3
CH <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	2.76	0.43	C <sub>5</sub> HNO <sub>2</sub>	5.88	0.54	C <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	4.82	0.69
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	2.75	0.83	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	6.25	0.37	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.2	0.51

C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	5.57	0.33	C <sub>8</sub> O	8.68	0.53	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub>	9.82	0.43
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	5.94	0.15	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N	9.06	0.36	115		
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.55	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub>	9.79	0.43	C <sub>2</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.44	0.65
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	5.93	0.55	113			C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.81	0.46
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	6.3	0.37	C <sub>2</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.78	0.46	C <sub>3</sub> HNO <sub>3</sub>	3.8	0.86
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	6.68	0.19	C <sub>3</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.14	0.67	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.17	0.67
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	6.66	0.59	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.51	0.48	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.54	0.48
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> NO	7.03	0.41	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	4.89	0.3	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	4.92	0.3
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	7.41	0.24	C <sub>4</sub> HO <sub>4</sub>	4.49	0.88	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	4.53	0.88
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O	7.76	0.46	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	4.87	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	4.9	0.7
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N	8.14	0.29	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.24	0.51	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.28	0.52
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>	8.87	0.35	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	5.62	0.33	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	5.65	0.33
C <sub>8</sub> N	9.03	0.36	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	5.99	0.15	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	6.02	0.16
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub>	9.76	0.42	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	5.6	0.73	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	5.63	0.73
111			C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	5.97	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	6.01	0.55
C <sub>3</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.48	0.48	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	6.35	0.37	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	6.38	0.37
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	4.85	0.3	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	6.72	0.19	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	6.76	0.2
C <sub>4</sub> HNO <sub>3</sub>	4.84	0.69	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	6.71	0.59	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	6.74	0.59
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.21	0.51	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO	7.08	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO	7.11	0.42
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	5.59	0.33	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	7.45	0.24	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	7.49	0.24
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	5.96	0.15	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> O	7.81	0.46	C <sub>6</sub> HN <sub>3</sub>	7.64	0.25
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.75	0.73	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N	8.19	0.29	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O	7.84	0.47
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	5.94	0.55	C <sub>7</sub> HN <sub>2</sub>	8.34	0.31	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N	8.22	0.3
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	6.32	0.37	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub>	8.92	0.35	C <sub>7</sub> HNO	8	0.48
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	6.69	0.19	C <sub>8</sub> HO	8.7	0.53	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	8.38	0.31
C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	6.67	0.59	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N	9.07	0.36	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> O	8.73	0.53
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> NO	7.05	0.41	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub>	9.81	0.43	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N	9.11	0.37
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	7.42	0.24	114			C <sub>9</sub> H <sub>7</sub>	9.84	0.43
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> O	7.78	0.46	C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.42	0.85	116		
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N	8.15	0.29	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.8	0.46	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.08	0.84
C <sub>8</sub> H <sub>15</sub>	8.88	0.35	C <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	3.78	0.86	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.45	0.65
C <sub>8</sub> HN	9.04	0.36	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.15	0.67	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.83	0.46
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub>	9.77	0.43	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.53	0.48	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	3.81	0.86
112			C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	4.9	0.3	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.19	0.67
C <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.77	0.46	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	4.51	0.88	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.56	0.49
C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.12	0.67	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	4.89	0.7	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	4.93	0.3
C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.5	0.48	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.26	0.51	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	4.54	0.88
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	4.87	0.3	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	5.63	0.33	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	4.92	0.7
C <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	4.48	0.88	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	6.01	0.15	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.29	0.52
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	4.85	0.7	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	5.62	0.73	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	5.67	0.34
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.23	0.51	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	5.99	0.55	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	6.04	0.16
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	5.6	0.33	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	6.37	0.37	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	5.65	0.73
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	5.98	0.15	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	6.74	0.2	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	6.02	0.55
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	5.58	0.73	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	6.72	0.59	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	6.4	0.37
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	5.96	0.55	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> NO	7.1	0.42	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	6.77	0.2
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	6.33	0.37	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	7.47	0.24	C <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	6.93	0.21
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	6.71	0.19	C <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	7.63	0.25	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	6.75	0.59
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	6.69	0.59	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O	7.83	0.47	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> NO	7.13	0.42
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> NO	7.06	0.41	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N	8.2	0.29	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	7.5	0.24
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	7.44	0.24	C <sub>7</sub> NO	7.98	0.48	C <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	7.29	0.43
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O	7.8	0.46	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	8.36	0.31	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	7.66	0.26
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N	8.17	0.29	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	8.93	0.35	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> O	7.86	0.47
C <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	8.33	0.3	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> O	8.72	0.53	C <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	7.64	0.65
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	8.9	0.35	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N	9.09	0.37	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> NO	8.02	0.48

C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	8.39	0.31	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.67	0.65	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O	8.81	0.54
C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O	8.75	0.54	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> NO	8.05	0.48	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N	9.19	0.37
C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N	9.12	0.37	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	8.42	0.31	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	9.92	0.44
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub>	9.85	0.43	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O	8.78	0.54	C <sub>10</sub>	10.81	0.53
117			C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N	9.15	0.37	121		
C <sub>2</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.1	0.84	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub>	9.89	0.44	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.16	0.84
C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.47	0.65	119			C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.53	0.65
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.85	0.46	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.13	0.84	C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.91	0.46
C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	3.83	0.86	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.5	0.65	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	3.89	0.86
C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.2	0.67	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.88	0.46	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.27	0.67
C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.52	0.49	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	3.86	0.86	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.64	0.49
C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	4.95	0.3	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.23	0.67	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	4.62	0.89
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	4.96	0.88	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.61	0.49	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	5	0.7
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	4.93	0.7	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	4.98	0.3	C <sub>4</sub> HN <sub>4</sub> O	5.9	0.35
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	5.31	0.52	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	4.59	0.88	C <sub>5</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.26	0.57
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	5.68	0.34	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	4.97	0.7	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	6.63	0.39
C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	6.06	0.16	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.34	0.52	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	7.01	0.21
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	5.66	0.73	C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	5.71	0.34	C <sub>6</sub> HO <sub>3</sub>	6.62	0.79
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	6.04	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	5.7	0.73	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	6.99	0.61
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	6.41	0.38	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	6.07	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	7.37	0.44
C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	6.79	0.2	C <sub>5</sub> HN <sub>3</sub> O	6.6	0.39	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	7.74	0.26
C <sub>5</sub> HN <sub>4</sub>	6.94	0.21	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	6.98	0.21	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	7.72	0.66
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	6.77	0.6	C <sub>6</sub> HNO <sub>2</sub>	6.96	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO	8.1	0.49
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO	7.14	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	7.33	0.43	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	8.47	0.32
C <sub>6</sub> HN <sub>2</sub> O	7.3	0.43	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	7.71	0.26	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> O	8.83	0.54
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	7.68	0.26	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.69	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	9.2	0.38
C <sub>7</sub> HO <sub>2</sub>	7.66	0.65	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NO	8.06	0.48	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub>	9.93	0.44
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> NO	8.03	0.48	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	8.44	0.31	C <sub>10</sub> H	10.82	53
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	8.41	0.31	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O	8.8	0.54	122		
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> O	8.76	0.54	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N	9.17	0.37	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.18	0.84
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N	9.14	0.37	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub>	9.9	0.44	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.55	0.65
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub>	9.87	0.43	120			C <sub>2</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.93	0.46
118			C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.14	0.84	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	3.91	0.86
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.11	0.84	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.52	0.65	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.28	0.67
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.49	0.65	C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.89	0.46	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	4.64	0.89
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	3.86	0.46	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	3.88	0.86	C <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.54	0.53
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	3.84	0.86	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.25	0.67	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	5.92	0.35
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4.22	0.67	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.62	0.49	C <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	5.9	0.75
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	4.59	0.49	C <sub>3</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	5	0.3	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.28	0.57
C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	4.97	0.3	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	4.61	0.88	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	6.65	0.39
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	4.57	0.88	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	4.98	0.7	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	7.02	0.21
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	4.95	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.36	0.52	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.63	0.79
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	5.32	0.52	C <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	5.89	0.35	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	7.01	0.61
C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	5.7	0.34	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	5.71	0.74	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	7.38	0.44
C <sub>4</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	6.07	0.16	C <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.24	0.57	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	7.76	0.26
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	5.68	0.73	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	6.62	0.39	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	7.74	0.66
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	6.05	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	6.99	0.21	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> NO	8.11	0.49
C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	6.43	0.38	C <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	6.6	0.78	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	8.49	0.32
C <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	6.59	0.39	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	6.98	0.61	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O	8.84	0.54
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	6.96	0.21	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	7.35	0.43	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N	9.22	0.38
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	6.79	0.6	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	7.72	0.26	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub>	9.95	0.44
C <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	6.94	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.71	0.66	C <sub>9</sub> N	10.11	0.46
C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	7.32	0.43	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> NO	0.08	0.49	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub>	10.84	0.53
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	7.69	0.26	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	8.46	0.32	123		

C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.19	0.84	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	6.7	0.39	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	6.73	0.4
C <sub>2</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3.57	0.65	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	7.07	0.22	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	7.1	0.22
C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	3.92	0.86	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	6.68	0.79	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	6.71	0.79
C <sub>4</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.56	0.53	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	7.06	0.61	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	7.09	0.62
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	5.94	0.35	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	7.43	0.44	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	7.46	0.44
C <sub>5</sub> HNO <sub>3</sub>	5.92	0.75	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	7.8	0.27	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	7.84	0.27
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	6.29	0.57	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	7.79	0.66	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	7.82	0.67
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	6.67	0.39	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO	8.16	0.49	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO	8.19	0.49
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	7.04	0.22	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	8.54	0.32	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	8.57	0.32
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.65	0.79	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> O	8.89	0.55	C <sub>7</sub> HN <sub>3</sub>	8.72	0.34
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	7.02	0.61	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N	9.27	0.38	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> O	8.92	0.55
C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	7.4	0.44	C <sub>8</sub> HN <sub>2</sub>	9.42	0.4	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N	9.3	0.38
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	7.77	0.26	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub>	10	0.45	C <sub>8</sub> HNO	9.08	0.57
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	7.75	0.66	C <sub>9</sub> HO	9.78	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	9.46	0.4
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO	8.13	0.49	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N	10.15	0.46	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub>	10.03	0.45
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	8.5	0.32	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub>	10.89	0.53	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> O	9.81	0.63
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O	8.86	0.55	126			C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N	10.19	0.47
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N	9.23	0.38	C <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.5	0.68	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub>	10.92	0.54
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub>	9.97	0.44	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.88	0.5	128		
C <sub>9</sub> HN	10.12	0.46	C <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	4.86	0.9	C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	4.16	0.87
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub>	10.85	0.53	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.23	0.71	C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.54	0.68
124			C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.61	0.53	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.91	0.5
C <sub>2</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	3.21	0.84	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	5.98	0.35	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	4.89	0.9
C <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.85	0.5	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.59	0.93	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.27	0.72
C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.2	0.71	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	5.97	0.75	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.64	0.53
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.58	0.53	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.34	0.57	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	6.02	0.36
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	5.95	0.35	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	6.71	0.39	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	5.62	0.93
C <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	5.56	0.93	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	7.09	0.22	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	6	0.75
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	5.93	0.75	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	6.7	0.79	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.37	0.57
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.31	0.57	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	7.07	0.62	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	6.75	0.4
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	6.68	0.39	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	7.45	0.44	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	7.12	0.22
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	7.06	0.22	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	7.82	0.27	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	6.73	0.79
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	6.66	0.79	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	7.8	0.66	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	7.1	0.62
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	7.04	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> NO	8.18	0.49	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	7.48	0.44
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	7.41	0.44	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	8.55	0.32	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	7.85	0.27
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	7.79	0.27	C <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	8.71	0.34	C <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	8.01	0.28
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	7.77	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O	8.91	0.55	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	7.83	0.67
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> NO	8.14	0.49	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N	9.28	0.38	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> NO	8.21	0.5
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	8.52	0.32	C <sub>8</sub> NO	9.07	0.56	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	8.85	0.33
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O	8.88	0.55	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	9.44	0.4	C <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	8.37	0.51
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N	9.25	0.38	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>	10.01	0.45	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	8.74	0.34
C <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	9.41	0.39	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> O	9.8	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O	8.94	0.55
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub>	9.98	0.45	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N	10.17	0.46	C <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	8.92	0.73
C <sub>9</sub> O	9.76	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub>	10.9	0.54	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N	9.31	0.39
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N	10.14	0.46	127			C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> NO	9.1	0.57
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub>	10.87	0.53	C <sub>3</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.52	0.68	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	9.47	0.4
125			C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.89	0.5	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	10.05	0.45
C <sub>3</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.86	0.5	C <sub>4</sub> HNO <sub>4</sub>	4.88	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> O	9.82	0.63
C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.22	0.71	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.25	0.71	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N	10.2	0.47
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.59	0.53	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.62	0.53	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub>	10.93	0.54
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	5.97	0.35	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	6	0.35	129		
C <sub>5</sub> HO <sub>4</sub>	5.58	0.93	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	5.61	0.93	C <sub>3</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	4.18	0.87
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	5.95	0.75	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	5.98	0.75	C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.55	0.69
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.32	0.57	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.36	0.57	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.93	0.5

C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	4.91	0.9	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> NO	9.13	0.57	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> O	10.00	0.65
C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.28	0.72	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	9.5	0.4	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N	10.38	0.49
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.66	0.54	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O	9.86	0.63	C <sub>9</sub> HNO	10.16	0.66
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	6.03	0.36	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N	10.23	0.47	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	10.54	0.5
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	5.64	0.93	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub>	10.97	0.54	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub>	11.11	0.56
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	6.01	0.75	138			C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> O	10.89	0.74
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.39	0.57	C <sub>3</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	4.32	0.88	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N	11.27	0.58
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	6.76	0.4	C <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.58	0.73	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub>	12.00	0.66
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	7.14	0.22	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	5.96	0.55	140		
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	6.74	0.79	C <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	5.94	0.95	C <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.24	0.91
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	7.12	0.62	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.32	0.77	C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.62	0.73
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	7.49	0.44	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.69	0.59	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	5.99	0.55
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	7.87	0.27	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	7.06	0.42	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	5.97	0.95
C <sub>6</sub> HN <sub>4</sub>	8.03	0.28	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.67	0.99	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.35	0.77
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	7.85	0.67	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	7.05	0.81	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.72	0.6
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> NO	8.22	0.5	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.42	0.64	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	7.1	0.42
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	8.6	0.33	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	8.8	0.47	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	6.7	0.99
C <sub>7</sub> HN <sub>2</sub> O	8.38	0.51	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	8.17	0.3	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	7.08	0.82
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	8.76	0.34	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	7.78	0.86	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.45	0.64
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O	8.96	0.55	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	8.15	0.69	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	7.83	0.44
C <sub>8</sub> HO <sub>2</sub>	8.74	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	8.53	0.52	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	8.2	0.3
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N	9.33	0.39	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	8.9	0.35	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	7.81	0.87
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> NO	9.11	0.57	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	8.88	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	8.18	0.69
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	9.49	0.4	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> NO	9.26	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	8.56	0.52
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> O	9.84	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	9.63	0.42	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	8.93	0.36
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N	10.22	0.47	C <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	9.96	0.43	C <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	9.09	0.37
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub>	10.95	0.54	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O	9.99	0.65	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	8.92	0.75
130			C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N	10.36	0.48	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> NO	9.29	0.58
C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	4.19	0.87	C <sub>9</sub> NO	10.15	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO	9.66	0.42
C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	4.57	0.69	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	10.52	0.5	C <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	9.45	0.6
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	4.94	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub>	11.09	0.56	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	9.82	0.43
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	4.92	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> O	10.88	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O	10.02	0.65
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	5.3	0.72	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N	11.25	0.57	C <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	9.8	0.83
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	5.67	0.54	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub>	11.98	0.65	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N	10.39	0.49
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	6.05	0.36	139			C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> NO	10.18	0.67
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	5.66	0.73	C <sub>4</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.6	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	10.55	0.5
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	6.03	0.75	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	5.97	0.55	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub>	11.13	0.56
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	6.4	0.58	C <sub>5</sub> HNO <sub>4</sub>	5.96	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> O	10.91	0.74
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	6.78	0.4	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.33	0.77	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N	10.28	0.58
C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	7.15	0.22	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.71	0.59	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub>	12.01	0.66
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	6.76	0.79	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	7.08	0.42	141		
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	7.14	0.62	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	6.69	0.99	C <sub>4</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.26	0.92
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	7.51	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	7.06	0.82	C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.63	0.73
C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	7.88	0.27	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.44	0.64	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.01	0.56
C <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	7.67	0.46	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	7.81	0.47	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	5.99	0.95
C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	8.04	0.29	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	8.19	0.3	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.36	0.77
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	7.87	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	7.79	0.86	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.74	0.6
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> NO	8.24	0.5	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	8.17	0.69	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	7.11	0.42
C <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	8.02	0.68	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	8.54	0.52	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	6.72	0.99
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	8.62	0.33	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	8.92	0.35	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	7.09	0.82
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	8.4	0.51	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	8.9	0.75	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.47	0.64
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	8.77	0.34	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> NO	9.27	0.58	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	7.84	0.47
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O	8.97	0.56	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	9.65	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	8.22	0.3
C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.75	0.74	C <sub>8</sub> HN <sub>3</sub>	9.81	0.43	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	7.83	0.87

C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	8.2	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.66	0.74	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> NO	9.35	0.59
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	8.57	0.53	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.04	0.56	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	9.14	0.77
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	8.95	0.36	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	6.02	0.95	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	9.73	0.42
C <sub>7</sub> HN <sub>4</sub>	9.11	0.37	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.4	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	9.51	0.6
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	8.93	0.75	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.77	0.6	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	9.89	0.44
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> NO	9.31	0.59	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	7.14	0.42	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O	10.08	0.66
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	9.68	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	6.75	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.87	0.84
C <sub>8</sub> HN <sub>2</sub> O	9.46	0.6	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	7.13	0.82	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> NO	10.24	0.67
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	9.84	0.43	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.5	0.65	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	10.62	0.51
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> O	10.04	0.65	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	7.88	0.47	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O	10.97	0.74
C <sub>9</sub> HO <sub>2</sub>	9.82	0.83	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	8.25	0.3	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N	11.35	0.58
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N	10.41	0.89	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	7.86	0.87	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub>	12.08	0.67
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> NO	10.19	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	8.23	0.7	C <sub>12</sub>	12.97	0.77
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	10.57	0.5	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	8.61	0.53	145		
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub>	11.14	0.56	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	8.98	0.36	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.32	0.92
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> O	10.93	0.74	C <sub>7</sub> HN <sub>3</sub> O	8.76	0.54	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.7	0.74
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N	11.3	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	9.14	0.37	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.07	0.56
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub>	12.03	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	8.96	0.76	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	6.05	0.96
142			C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> NO	9.34	0.59	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.34	0.78
C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.27	0.92	C <sub>8</sub> HNO <sub>2</sub>	9.12	0.77	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.8	0.6
C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.65	0.74	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	9.71	0.42	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	7.18	0.43
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.02	0.56	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	9.49	0.6	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	6.78	1.00
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	6.00	0.95	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	9.87	0.44	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	7.16	0.82
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.38	0.77	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> O	10.07	0.65	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.53	0.65
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.95	0.6	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.85	0.83	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	7.91	0.48
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	7.13	0.42	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N	10.44	0.49	C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	8.28	0.3
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	6.74	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> NO	10.23	0.67	C <sub>6</sub> HN <sub>4</sub> O	8.06	0.49
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	7.11	0.82	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	10.6	0.51	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	7.89	0.87
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.48	0.64	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O	10.96	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	8.26	0.7
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	7.86	0.47	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N	11.33	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	8.64	0.53
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	8.23	0.3	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub>	12.06	0.66	C <sub>7</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.42	0.71
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	7.84	0.87	144			C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	9.01	0.36
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	8.22	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.31	0.92	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	8.8	0.54
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	8.59	0.53	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.68	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	9.17	0.38
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	8.96	0.36	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.05	0.56	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	9.00	0.76
C <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	8.75	0.45	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	6.04	0.95	C <sub>8</sub> HO <sub>3</sub>	8.78	0.94
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	9.12	0.37	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.41	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> NO	9.37	0.59
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	8.95	0.75	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.79	0.6	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	9.15	0.77
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO	9.32	0.59	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	7.16	0.42	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	9.53	0.61
C <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	9.1	0.77	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	6.76	1.00	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	9.9	0.44
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	9.7	0.42	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	7.14	0.82	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	9.88	0.84
C <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	9.48	0.6	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.52	0.65	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO	10.26	0.67
C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	9.85	0.44	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	7.89	0.47	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	10.63	0.51
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O	10.05	0.65	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	8.27	0.3	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O	10.99	0.75
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.44	0.83	C <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	8.05	0.49	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N	11.36	0.59
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N	10.43	0.49	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	7.87	0.87	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub>	12.09	0.67
C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> NO	10.21	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> NO	8.25	0.7	C <sub>12</sub> H	12.98	0.77
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	10.58	0.51	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	8.62	0.53	146		
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	11.16	0.56	C <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.41	0.711	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.34	0.92
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O	10.94	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	9.00	0.36	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.7	0.74
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N	11.32	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	8.78	0.54	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.09	0.56
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub>	12.05	0.66	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	9.15	0.38	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	6.07	0.96
143			C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	8.98	0.76	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.44	0.78
C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.29	0.92	C <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	8.76	0.94	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.82	0.6



C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	7.19	0.43	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	10.66	0.51	C <sub>7</sub> HO <sub>4</sub>	7.74	1.06
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	6.8	1.00	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O	11.02	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	8.11	0.89
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	7.17	0.82	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N	11.4	0.59	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.49	0.72
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.55	0.65	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub>	12.13	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	8.86	0.55
C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	7.92	0.48	C <sub>11</sub> HN	12.28	0.69	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	9.23	0.38
C <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.71	0.66	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub>	13.02	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	8.84	0.95
C <sub>6</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	8.3	0.33	148			C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	9.22	0.78
C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	8.08	0.49	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.37	0.92	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	9.59	0.81
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	7.91	0.87	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.74	0.74	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	9.97	0.45
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	8.28	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.12	0.56	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	9.95	0.84
C <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	8.06	0.88	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	6.1	0.96	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO	10.32	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	8.65	0.53	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.48	0.78	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	10.7	0.52
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.44	0.71	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.85	0.6	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O	11.05	0.75
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	8.81	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	7.22	0.43	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N	11.43	0.59
C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	9.19	0.38	C <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.01	0.61	C <sub>10</sub> HN <sub>2</sub>	11.58	0.81
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	9.01	0.76	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	6.83	1.00	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub>	12.16	0.67
C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.79	0.94	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	7.21	0.83	C <sub>11</sub> HO	11.94	0.85
C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	9.17	0.77	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.58	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N	12.32	0.69
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	9.54	0.61	C <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.36	0.84	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub>	13.05	0.78
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	9.92	0.44	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.74	0.66	150		
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	9.9	0.84	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	8.11	0.49	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.4	0.92
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> NO	10.27	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	7.94	0.88	C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.78	0.74
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	10.65	0.51	C <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	7.72	1.06	C <sub>4</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.15	0.56
C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O	11.01	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	8.09	0.89	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	6.13	0.96
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N	11.38	0.59	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.47	0.72	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.51	0.78
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub>	12.11	0.67	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	8.84	0.55	C <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.66	0.79
C <sub>11</sub> N	12.27	0.69	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	9.22	0.38	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.04	0.62
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub>	13.00	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	8.83	0.94	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	6.86	1.00
147			C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	9.2	0.78	C <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	7.02	1.01
C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.35	0.92	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	9.57	0.81	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.4	0.84
C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.73	0.74	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	9.95	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.77	0.67
C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.1	0.56	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	9.93	0.84	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	8.14	0.49
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	6.08	0.96	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> NO	10.31	0.68	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.75	1.06
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.46	0.78	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	10.68	0.52	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	8.13	0.89
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.83	0.6	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O	11.04	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.5	0.72
C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	7.21	0.43	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N	11.41	0.59	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	8.88	0.55
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	6.82	1.00	C <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	11.57	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	9.25	0.38
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	7.19	0.82	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub>	12.14	0.67	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	8.86	0.95
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.56	0.65	C <sub>11</sub> O	11.93	0.85	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	9.23	0.78
C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	7.94	0.48	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N	12.3	0.69	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	9.61	0.61
C <sub>6</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.72	0.66	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub>	13.03	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	9.98	0.45
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	8.1	0.49	149			C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	9.96	0.84
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	7.92	0.87	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.39	0.92	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO	10.34	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	8.3	0.7	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.76	0.74	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	10.71	0.52
C <sub>7</sub> HNO <sub>3</sub>	8.08	0.89	C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	6.13	0.56	C <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	10.87	0.54
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.45	0.72	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	6.12	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O	11.07	0.75
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	8.83	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	6.49	0.78	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N	11.44	0.6
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	9.2	0.38	C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	6.87	0.61	C <sub>10</sub> NO	11.23	0.77
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.81	0.94	C <sub>5</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.02	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	11.6	0.81
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	9.18	0.78	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	6.85	1.00	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub>	12.17	0.68
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	9.56	0.61	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	7.22	0.83	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> O	11.96	0.85
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	9.93	0.44	C <sub>6</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.38	0.84	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N	12.33	0.7
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	9.92	0.84	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.75	0.66	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub>	13.06	0.78
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO	10.29	0.68	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	8.13	0.49	151		

C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.42	0.92	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O	11.1	0.76	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	8.92	0.95
C <sub>4</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	5.79	0.74	C <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	10.88	0.93	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	9.3	0.79
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	6.15	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N	111.48	0.6	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	9.67	0.62
C <sub>5</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.68	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> NO	11.26	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	10.05	0.46
C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.05	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	11.63	0.62	C <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	9.83	0.63
C <sub>6</sub> HNO <sub>4</sub>	7.04	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> O	12.21	0.68	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	10.2	0.47
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.41	0.84	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> O	11.99	0.86	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	10.03	0.85
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.79	0.67	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N	12.36	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> NO	10.4	0.69
C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	8.16	0.5	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub>	13.1	0.79	C <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	10.19	0.87
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	7.77	1.06	153			C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	10.78	0.53
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	8.14	0.89	C <sub>5</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.34	0.97	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	10.56	0.7
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.52	0.72	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.71	0.8	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	10.93	0.54
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	8.89	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.09	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O	11.13	0.76
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	9.27	0.39	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	7.07	1.02	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.92	0.94
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	8.87	0.95	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.44	0.84	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> ON	11.51	0.6
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	9.25	0.78	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.82	0.67	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> NO	11.29	0.78
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	9.62	0.62	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	8.19	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	11.66	0.62
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	10.00	0.45	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	7.8	1.07	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub>	12.24	0.68
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	9.98	0.85	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	8.17	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O	12.02	0.86
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> NO	10.35	0.68	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.55	0.72	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N	12.4	0.7
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	10.73	0.52	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	8.92	0.56	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	13.13	0.79
C <sub>9</sub> HN <sub>3</sub>	10.89	0.54	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	9.3	0.39	155		
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O	11.09	0.76	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	8.91	0.95	C <sub>5</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.37	0.97
C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N	11.46	0.6	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	9.28	0.78	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.74	0.8
C <sub>10</sub> HNO	11.24	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	9.65	0.62	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.12	0.62
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	11.62	0.61	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	10.03	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	7.1	1.02
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub>	12.19	0.68	C <sub>8</sub> HN <sub>4</sub>	10.19	0.47	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.48	0.84
C <sub>11</sub> H <sub>30</sub>	11.97	0.85	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	10.01	0.85	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.85	0.67
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N	12.35	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> NO	10.39	0.69	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	8.22	0.5
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub>	13.08	0.79	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	10.76	0.52	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	7.83	1.07
152			C <sub>9</sub> HN <sub>2</sub> O	10.54	0.7	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	8.21	0.9
C <sub>4</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	5.43	0.92	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	10.92	0.54	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.58	0.73
C <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.32	0.97	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> O	11.12	0.76	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	8.96	0.56
C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.7	0.79	C <sub>10</sub> HO <sub>2</sub>	10.9	0.94	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	9.33	0.39
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.07	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N	11.49	0.6	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	8.94	0.95
C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	7.05	1.01	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> NO	11.27	0.78	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	9.31	0.79
C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.43	0.84	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	11.65	0.62	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	9.69	0.62
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.8	0.67	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub>	12.22	0.68	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	10.06	0.46
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	8.18	0.5	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> O	12.01	0.86	C <sub>8</sub> HN <sub>3</sub> O	9.84	0.64
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	7.78	1.06	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N	12.38	0.7	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	10.22	0.74
C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	8.16	0.89	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub>	13.11	0.79	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	10.04	0.85
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.53	0.72	154			C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO	10.42	0.96
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	8.91	0.55	C <sub>5</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.35	0.97	C <sub>9</sub> HNO <sub>2</sub>	10.2	0.87
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	9.28	0.39	C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.73	0.8	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	10.79	0.53
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	8.89	0.95	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.1	0.62	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	10.58	0.71
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	9.26	0.78	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	7.09	1.02	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	10.95	0.54
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	9.64	0.62	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.46	0.84	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> O	11.15	0.76
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	10.01	0.45	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.83	0.67	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.93	0.94
C <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	10.17	0.47	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	8.21	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N	11.52	0.6
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	10.00	0.85	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	7.82	1.07	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> NO	11.31	0.78
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> NO	10.37	0.68	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	8.19	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	11.68	0.62
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	10.74	0.52	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.57	0.73	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub>	12.25	0.69
C <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	10.53	0.7	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	8.94	0.56	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> O	12.04	0.85
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	10.9	0.54	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	9.31	0.39	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N	12.41	0.71

C <sub>12</sub> H <sub>11</sub>	13.14	0.79	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	9.34	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO	11.35	0.79
156			C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	9.72	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	11.73	0.63
C <sub>5</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.39	0.98	C <sub>8</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.5	0.8	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O	11.09	0.87
C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.76	0.8	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	10.09	0.46	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N	12.46	0.71
C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.14	0.62	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	9.86	0.54	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub>	13.19	0.8
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	7.12	1.02	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	10.25	0.48	C <sub>12</sub> N	13.35	0.82
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.49	0.85	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	10.08	0.86	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub>	14.08	0.92
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.87	0.67	C <sub>9</sub> HO <sub>3</sub>	9.86	1.03	159		
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	8.24	0.5	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> NO	10.45	0.69	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.43	0.98
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	7.85	1.07	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	10.23	0.87	C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.81	0.8
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	8.22	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	10.82	0.63	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.18	0.63
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.6	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	10.61	0.71	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	7.17	1.02
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	8.97	0.56	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	10.98	0.55	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.54	0.85
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	9.35	0.39	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> O	11.18	0.77	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.91	0.68
C <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	9.13	0.57	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	10.96	0.94	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	8.29	0.51
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	8.95	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N	11.56	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	7.9	1.07
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	9.33	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> NO	11.34	0.78	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	8.27	0.9
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	9.7	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	11.71	0.63	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.65	0.73
C <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.49	0.8	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> O	12.07	0.86	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	9.02	0.56
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	10.08	0.46	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N	12.44	0.71	C <sub>7</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.8	0.75
C <sub>8</sub> HH <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	9.86	0.64	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub>	13.18	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	9.39	0.4
C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	10.23	0.47	C <sub>13</sub> H	14.06	0.91	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	9.18	0.58
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	10.06	0.85	158		C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	9.00	0.96	
C <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	9.84	1.03	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.42	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	9.38	0.79
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> NO	10.43	0.69	C <sub>5</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.79	0.8	C <sub>8</sub> HNO <sub>3</sub>	9.16	0.97
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	10.22	0.87	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.17	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	9.75	0.63
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	10.81	0.53	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	7.15	1.02	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.56	0.81
C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	10.59	0.71	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.52	0.85	C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	10.13	0.86
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	10.97	0.55	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.9	0.68	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	9.91	0.64
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O	11.17	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	8.27	0.5	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	10.28	0.48
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.95	0.94	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	7.88	1.07	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	10.11	0.86
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N	11.54	0.61	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	8.25	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.89	1.04
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> NO	11.32	0.78	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.63	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> NO	10.48	0.7
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	11.7	62.00	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	9.00	0.56	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	10.27	0.87
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	12.27	0.69	C <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.79	0.74	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	10.64	0.71
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> O	12.05	0.86	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	9.38	0.4	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	11.01	0.55
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N	12.43	0.71	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	9.16	0.58	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	11.00	0.95
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub>	13.16	0.8	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	8.99	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO	11.36	0.79
C <sub>13</sub>	14.05	0.91	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	9.36	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	11.74	0.63
157			C <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	9.14	0.97	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> O	12.1	0.87
C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.4	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	9.73	0.63	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N	12.48	0.71
C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.78	0.8	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.52	0.81	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub>	13.21	0.8
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.15	0.62	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	10.11	0.46	C <sub>12</sub> HN	13.36	0.82
C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	7.13	1.02	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	9.89	0.64	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub>	14.1	0.92
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.51	0.95	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	10.27	0.48	160		
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.88	0.67	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	10.09	0.86	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.45	0.98
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	8.26	0.5	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.87	1.04	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.82	0.8
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	7.86	1.07	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> NO	10.47	0.69	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.2	0.63
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	8.24	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	10.25	0.87	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	7.18	1.02
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.61	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	10.84	0.53	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.56	0.85
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	8.99	0.56	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	10.62	0.71	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.93	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	9.36	0.39	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	11.00	0.55	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	8.3	0.51
C <sub>7</sub> HN <sub>3</sub> O	9.15	0.57	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O	11.2	0.77	C <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.09	0.69
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	8.97	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	10.98	0.95	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	7.91	1.07

C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	8.29	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	10.3	0.88	C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.87	0.81
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.66	0.73	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	10.67	0.72	C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.25	0.63
C <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.44	0.92	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	11.05	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	7.23	1.03
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	9.04	0.57	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	11.03	0.95	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.6	0.85
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.82	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> NO	11.4	0.79	C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.98	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	9.41	0.4	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	11.78	0.63	C <sub>6</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.76	0.87
C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	9.19	0.58	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> O	12.13	0.87	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.14	0.69
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	9.02	0.96	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N	12.51	0.72	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	7.96	1.08
C <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	8.8	1.14	C <sub>11</sub> HN <sub>2</sub>	12.67	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>	8.33	0.91
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	9.39	0.79	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub>	13.24	0.81	C <sub>7</sub> HNO <sub>4</sub>	8.12	1.09
C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	9.18	0.97	C <sub>12</sub> HO	13.02	0.98	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.49	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	9.77	0.63	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N	13.4	0.83	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.87	0.75
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.55	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub>	14.13	0.92	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	9.24	0.58
C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	9.92	0.64	162			C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	8.85	1.15
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	10.3	0.48	C <sub>5</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.48	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	9.22	0.98
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	10.12	0.86	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.86	0.81	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.6	0.81
C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	9.91	1.04	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.23	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	9.97	0.65
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	10.28	0.88	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	7.21	1.03	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	10.35	0.49
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	10.66	0.71	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.59	0.85	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	9.95	1.04
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	11.03	0.55	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.96	0.68	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	10.33	0.88
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	11.01	0.95	C <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.75	0.86	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	10.7	0.72
C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> NO	11.39	0.79	C <sub>6</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O	8.34	0.51	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	11.08	0.56
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	11.76	0.63	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.12	0.69	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	11.06	0.95
C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O	12.12	0.87	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	7.94	1.08	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO	11.43	0.8
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N	12.49	0.72	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub>	8.32	0.91	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	11.81	0.64
C <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	12.65	0.73	C <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	8.1	1.09	C <sub>10</sub> HN <sub>3</sub>	11.97	0.66
C <sub>12</sub> H <sub>16</sub>	13.22	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.69	0.74	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O	12.17	0.88
C <sub>12</sub> O	13.01	0.98	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.48	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N	12.54	0.72
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N	13.38	0.82	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.85	0.75	C <sub>11</sub> HNO	12.32	0.89
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub>	14.11	0.92	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	9.23	0.58	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	12.7	0.74
161			C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	9.05	0.96	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub>	13.27	0.81
C <sub>5</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.47	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.83	1.15	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> O	13.05	0.98
C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.84	0.8	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	9.21	0.98	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N	13.43	0.83
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.22	0.63	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.58	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub>	14.16	0.93
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	7.2	1.03	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	9.96	0.65	164		
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.57	0.85	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	10.33	0.48	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.51	0.98
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	7.95	0.68	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	9.94	1.04	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.89	0.81
C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	8.32	0.51	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.31	0.88	C <sub>5</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	7.26	0.63
C <sub>6</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.1	0.69	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	10.69	0.72	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>4</sub>	7.25	1.03
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	7.93	1.08	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	11.06	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.62	0.86
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	8.3	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	11.04	0.95	C <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.4	1.04
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.68	0.74	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> NO	11.42	0.79	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.78	0.87
C <sub>7</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.46	0.92	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	11.79	0.64	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.15	0.7
C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	9.05	0.57	C <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	11.95	0.65	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	7.98	1.08
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.83	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O	12.15	0.87	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	8.13	1.09
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	9.21	0.58	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N	12.52	0.72	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.51	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	9.03	0.96	C <sub>11</sub> NO	12.31	0.89	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.88	0.75
C <sub>8</sub> HO <sub>4</sub>	8.82	1.14	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	12.68	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	9.26	0.59
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	9.41	0.8	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub>	13.26	0.81	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	8.87	1.15
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	9.19	0.98	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> O	13.04	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	9.24	0.98
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.57	0.81	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N	13.41	0.83	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.61	0.81
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	9.94	0.65	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub>	14.14	0.92	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	9.99	0.65
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	10.31	0.48	163			C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	10.36	0.49
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	9.92	1.04	C <sub>5</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.5	0.98	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	9.97	1.05

C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	10.35	0.88	C <sub>5</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.55	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> NO	11.5	0.8
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	10.72	0.72	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.43	1.04	C <sub>10</sub> HNO <sub>2</sub>	11.28	0.98
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	11.09	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.81	0.87	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	11.87	0.64
C <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	11.25	0.58	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.18	0.7	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	11.66	0.82
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	11.08	0.96	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	8.17	1.09	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	12.03	0.66
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> NO	11.45	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.54	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> O	12.23	0.88
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	11.82	0.64	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.91	0.76	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.01	1.06
C <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	11.61	0.81	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	9.29	0.59	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N	12.6	0.73
C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	11.98	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	8.9	1.15	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> NO	12.39	0.9
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O	12.18	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	9.27	0.98	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	12.76	0.75
C <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	11.96	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.65	0.82	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub>	13.34	0.82
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N	12.56	0.72	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	10.02	0.65	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O	13.12	0.99
C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> NO	12.34	0.9	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	10.39	0.49	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N	13.49	0.84
C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	12.71	0.74	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	10	1.05	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub>	14.22	0.94
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> O	13.29	0.81	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	10.38	0.89	168		
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O	13.07	0.98	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	10.75	0.72	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.47	1.04
C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N	13.44	0.83	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	11.13	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.84	0.87
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub>	14.18	0.93	C <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	10.91	0.74	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.22	0.7
165			C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	11.28	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	8.2	1.1
C <sub>5</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	6.53	0.98	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	11.11	0.96	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.57	0.93
C <sub>5</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	6.9	0.81	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO	11.48	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.95	0.76
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>	7.26	1.03	C <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	11.27	0.98	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	9.32	0.59
C <sub>6</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.42	1.04	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	11.86	0.64	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	8.93	1.15
C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.79	0.87	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	11.64	0.82	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	9.3	0.99
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.17	0.7	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	12.01	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.68	0.82
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	8.15	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O	12.21	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	10.05	0.66
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.52	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12	1.06	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	10.43	0.49
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.9	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N	12.59	0.73	C <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	10.21	0.67
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	9.27	0.59	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> NO	12.37	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	10.03	1.05
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	8.88	1.15	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	12.75	0.75	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	10.41	0.89
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	9.26	0.92	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub>	13.32	0.82	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	10.78	0.73
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.63	0.82	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O	13.1	0.99	C <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.57	0.51
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	10	0.65	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N	13.48	0.84	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	11.16	0.57
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	10.38	0.49	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub>	14.21	0.93	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	10.94	0.74
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	9.99	1.05	167			C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	11.32	0.58
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	10.36	0.88	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.45	1.04	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	11.14	0.96
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	10.74	0.72	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.83	0.87	C <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	10.92	1.14
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	11.11	0.56	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.2	0.7	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO	11.51	0.8
C <sub>9</sub> HN <sub>4</sub>	11.27	0.58	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	8.18	1.1	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	11.3	0.98
C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	11.09	0.96	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.56	0.93	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	11.89	0.65
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> NO	11.47	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.93	0.76	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	11.67	0.82
C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	11.84	0.64	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	9.31	0.59	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	12.05	0.67
C <sub>10</sub> HN <sub>2</sub> O	11.62	0.82	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	8.91	1.15	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O	12.25	0.89
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	12	0.66	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	9.29	0.99	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.03	1.06
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> O	12.2	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.66	0.82	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N	12.62	0.73
C <sub>11</sub> HO <sub>2</sub>	11.98	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	10.04	0.66	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> NO	12.4	0.9
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N	12.57	0.73	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	10.41	0.49	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	12.78	0.75
C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> NO	12.36	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	10.02	1.05	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub>	13.35	0.82
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	12.73	0.74	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	10.39	0.89	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O	13.13	0.99
C <sub>12</sub> H <sub>21</sub>	13.3	0.81	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	10.77	0.73	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N	13.51	0.84
C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> O	13.09	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	11.14	0.57	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub>	14.24	0.94
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N	13.46	0.84	C <sub>9</sub> HN <sub>3</sub> O	10.92	0.74	C <sub>14</sub>	15.13	1.06
C <sub>13</sub> H <sub>9</sub>	14.19	0.93	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	11.3	0.58	169		
166			C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	11.12	0.96	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.48	1.05

C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.86	0.87	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	10.82	0.73	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	12.08	1.07
C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.23	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.6	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N	12.67	0.74
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	8.21	1.1	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	11.19	0.57	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> NO	12.45	0.91
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.59	0.93	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	10.97	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	12.83	0.76
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.96	0.76	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	11.35	0.59	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> O	13.18	1
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	9.34	0.59	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	11.17	0.97	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N	13.56	0.85
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	8.95	1.16	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.96	1.14	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub>	14.29	0.94
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	9.32	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO	11.55	0.81	C <sub>13</sub> HN	14.45	0.97
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.69	0.82	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	11.33	0.92	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub>	15.18	1.07
C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	10.07	0.66	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	11.92	0.65	172		
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	10.44	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	11.7	0.83	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.53	1.05
C <sub>8</sub> HN <sub>4</sub> O	10.23	0.67	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	12.08	0.67	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.91	0.88
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	10.05	1.05	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O	12.28	0.89	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.28	0.71
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	10.43	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	12.06	1.06	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	8.26	1.1
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	10.8	0.73	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N	12.65	0.74	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.64	0.93
C <sub>9</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.52	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> NO	12.44	0.91	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.01	0.76
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	11.17	0.57	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	12.81	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	9.39	0.6
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	10.96	0.75	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	13.38	0.83	C <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.17	0.78
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	11.33	0.59	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O	13.17	1.00	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	8.99	1.16
C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	11.16	0.96	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N	13.54	0.85	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	9.37	0.99
C <sub>10</sub> HO <sub>3</sub>	10.94	1.14	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub>	14.27	0.94	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.74	0.83
C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> NO	11.53	0.81	C <sub>13</sub> N	14.43	0.96	C <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.52	1.01
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	11.31	0.98	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub>	15.16	1.07	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	10.12	0.66
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	11.9	0.65	171			C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.9	0.84
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	11.69	0.82	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.51	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	10.49	0.5
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	12.06	0.67	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>23</sub> O <sub>3</sub>	7.89	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	10.27	0.68
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> O	12.26	0.89	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.26	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	10.1	1.06
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	12.04	1.06	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	8.25	1.1	C <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	9.88	1.24
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N	12.64	0.73	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	8.62	0.93	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	10.47	0.9
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> NO	12.42	0.91	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.99	0.76	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	10.26	1.07
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	12.79	0.75	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>10</sub>	9.37	0.6	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	10.85	0.73
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub>	13.37	0.82	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	8.98	1.16	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.63	0.91
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> O	13.15	1.00	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	9.35	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	11.22	0.57
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N	13.52	0.84	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.73	0.83	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	11	0.75
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub>	14.26	0.94	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	10.1	0.66	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	11.38	0.59
C <sub>14</sub> H	15.14	1.07	C <sub>8</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.88	0.84	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	11.2	0.97
170			C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	10.47	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	10.99	1.15
C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.5	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	10.26	0.68	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> NO	11.58	0.81
C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.87	0.87	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	10.08	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	11.36	0.99
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.25	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	10.46	0.89	C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	11.95	0.65
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	8.23	1.1	C <sub>9</sub> HNO <sub>3</sub>	10.24	1.07	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	11.74	0.83
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.6	0.93	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	10.83	0.73	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	12.11	0.67
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	8.98	0.76	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.61	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O	12.31	0.89
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	9.35	0.59	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	11.21	0.57	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	12.09	1.07
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	8.96	1.16	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	10.99	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> NO	12.47	0.91
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	9.34	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	11.36	0.59	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	12.84	0.76
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.71	0.82	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	11.19	0.97	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O	13.2	1
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	10.08	0.66	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.97	1.14	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N	13.57	0.85
C <sub>8</sub> N <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	9.87	0.84	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> NO	11.56	0.81	C <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	13.73	0.87
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	10.46	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	11.35	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub>	14.3	0.95
C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	10.24	0.68	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	11.94	0.65	C <sub>13</sub> O	14.09	1.12
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	10.07	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	11.72	0.83	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N	14.46	0.97
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	10.44	0.89	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	12.09	0.67	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub>	15.19	1.07
C <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	10.22	1.07	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> 3O	12.29	0.89	173		

C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.55	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.77	0.83	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	11.05	0.76
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.92	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.56	1.01	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	11.43	0.6
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.3	0.71	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O	10.15	0.67	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	11.04	1.15
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	8.28	1.1	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.93	0.85	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	11.41	0.99
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.65	0.93	C <sub>8</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub>	10.52	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	11.78	0.83
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.03	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	10.31	0.68	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	12.16	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	9.4	0.62	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	10.13	1.06	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	12.14	1.07
C <sub>7</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.18	0.78	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.91	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> NO	12.52	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	9.01	1.16	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>2</sub>	10.51	0.9	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	12.89	0.77
C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	9.38	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	10.29	1.08	C <sub>11</sub> HN <sub>3</sub>	13.05	0.78
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.76	0.83	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	10.88	0.74	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> O	13.25	1.01
C <sub>8</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.54	1.01	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.66	0.92	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N	13.62	0.86
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	10.13	0.66	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	11.04	0.75	C <sub>12</sub> HNO	13.4	1.03
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.92	0.84	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	11.41	0.6	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	13.78	0.88
C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	10.51	0.5	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	11.24	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub>	14.35	0.95
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	10.29	0.68	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	11.02	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> O	14.13	1.12
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	10.11	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	11.39	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N	14.51	0.98
C <sub>9</sub> HO <sub>4</sub>	9.9	1.24	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	11.77	0.83	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub>	15.24	1.08
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	10.49	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	12.14	0.68	176		
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	10.27	1.08	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	12.12	1.07	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.59	1.05
C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	10.86	0.74	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO	12.5	0.92	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.97	0.88
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.65	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	12.87	0.76	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.34	0.71
C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	11.24	0.58	C <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	13.03	0.78	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>4</sub>	8.33	1.11
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	11.02	0.75	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> O	13.23	1.01	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.7	0.94
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	11.4	0.59	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N	13.6	0.85	C <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.48	1.12
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	11.22	0.97	C <sub>12</sub> NO	13.39	1.03	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.07	0.77
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	11	1.15	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	13.76	0.88	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.86	0.95
C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> NO	11.59	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub>	14.34	0.95	C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> ON <sub>4</sub> O	9.45	0.6
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	11.38	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> O	14.12	1.12	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.23	0.78
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	11.75	0.83	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N	14.49	0.97	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	9.06	1.17
C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	12.13	0.67	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub>	15.22	1.08	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>3</sub>	9.43	1
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	12.11	1.07	175			C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	9.21	1.18
C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> NO	12.48	0.91	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.58	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.81	0.83
C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	12.86	0.76	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.95	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.59	1.01
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> O	13.21	1	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.33	0.71	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.96	0.85
C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N	13.59	0.85	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	8.31	1.11	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	10.34	0.69
C <sub>12</sub> HN <sub>2</sub>	13.75	0.87	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.68	0.94	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O <sub>3</sub>	10.16	1.07
C <sub>13</sub> H <sub>17</sub>	14.32	0.95	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.06	0.77	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	9.95	1.24
C <sub>13</sub> HO	14.1	1.12	C <sub>7</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.84	0.95	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	10.32	1.08
C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N	14.48	0.97	C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O	9.43	0.6	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.69	0.92
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub>	15.21	1.07	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.22	0.78	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	11.07	0.76
174			C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	9.04	1.16	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	11.44	0.6
C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.56	1.05	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>	9.42	1	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	11.05	1.15
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.94	0.88	C <sub>8</sub> HNO <sub>4</sub>	9.2	1.18	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	11.43	0.99
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.31	0.71	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.79	0.83	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	11.8	0.84
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	8.29	1.1	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.57	1.01	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	12.17	0.68
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.67	0.93	C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	10.16	0.67	C <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	12.33	0.7
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.04	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.95	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	12.16	1.08
C <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.83	0.95	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	10.32	0.68	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> NO	12.53	0.92
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O	9.42	0.6	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub>	10.15	1.06	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	12.91	0.77
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.2	0.78	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	9.93	1.24	C <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	12.69	0.94
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	9.03	1.16	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub>	10.52	0.9	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	13.06	0.79
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub>	9.4	1	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	10.3	1.08	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O	13.26	1.01
C <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	9.18	1.18	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.68	0.92	C <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	13.05	1.18

C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N	13.64	0.86	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.89	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	12.38	0.71
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> NO	13.42	1.03	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.26	0.79	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	12.2	1.08
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	13.79	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	9.09	1.17	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> NO	12.58	0.93
C <sub>13</sub> H <sub>20</sub>	14.37	0.96	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	9.25	1.18	C <sub>11</sub> HNO <sub>2</sub>	12.36	1.1
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> O	14.15	1.13	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.62	1.02	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	12.95	0.77
C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N	14.53	0.98	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.00	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	12.74	0.95
C <sub>14</sub> H <sub>8</sub>	15.26	1.08	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	10.37	0.69	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	13.11	0.79
177			C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	9.98	1.25	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> O	13.31	1.02
C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.61	1.06	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	10.35	1.08	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.09	1.19
C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	7.29	0.88	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	1.73	0.92	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N	13.68	0.87
C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.36	0.71	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	11.1	0.76	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> NO	13.47	1.04
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>	8.34	1.11	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	11.48	0.6	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	13.84	0.89
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.72	0.94	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	11.08	1.16	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub>	14.42	0.96
C <sub>7</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.5	1.12	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	11.46	1.00	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> O	14.2	1.13
C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.09	0.77	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	11.83	0.84	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N	14.57	0.99
C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.87	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	12.21	0.68	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub>	15.3	1.09
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.25	0.78	C <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	11.99	0.86	180		
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub>	9.07	1.17	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	12.36	0.7	C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.66	1.06
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	9.45	1.00	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	12.19	1.08	C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.55	1.12
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	9.23	1.18	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> NO	12.56	0.96	C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.92	0.96
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.6	1.01	C <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	12.35	1.1	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.3	0.79
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	9.98	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	12.94	0.77	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	9.28	1.18
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	10.35	0.69	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	12.72	0.94	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	9.65	1.02
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	9.96	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	13.09	0.79	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.03	0.85
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	10.34	1.08	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O	13.29	1.01	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	10.4	0.69
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.71	0.92	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.08	1.19	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	10.01	1.25
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	10.08	0.76	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N	13.67	0.86	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	10.38	1.09
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	11.46	0.6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> NO	13.45	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.76	0.93
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	11.07	1.16	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	13.83	0.88	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	11.13	0.77
C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	11.44	1.00	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub>	14.4	0.96	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	11.51	0.61
C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	11.82	0.48	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> O	14.18	1.13	C <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	11.29	0.78
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	12.19	0.68	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N	14.56	0.98	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	11.12	1.16
C <sub>10</sub> HN <sub>4</sub>	12.35	0.7	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	15.29	1.09	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	11.49	1
C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	12.17	1.08	179			C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	11.86	0.84
C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO	12.55	0.92	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.64	1.06	C <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.65	1.02
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	12.92	0.77	C <sub>6</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.02	0.89	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	12.24	0.69
C <sub>11</sub> HN <sub>2</sub> O	12.7	0.94	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	8.37	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	12.02	0.86
C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	13.08	0.79	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.53	1.12	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	12.4	0.71
C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> O	13.28	1.01	C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.91	0.95	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	12.22	1.08
C <sub>12</sub> HO <sub>2</sub>	13.06	1.18	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.28	0.79	C <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	12.00	1.26
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N	13.65	0.86	C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	9.26	1.18	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> NO	12.6	0.93
C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> NO	13.44	1.03	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.64	1.02	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	12.38	1.1
C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	13.81	0.88	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.01	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	12.97	0.78
C <sub>13</sub> H <sub>21</sub>	14.38	0.96	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	10.39	0.69	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	12.75	0.95
C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> O	14.17	1.13	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	9.99	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	13.13	0.8
C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N	14.54	0.98	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	10.37	1.09	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O	13.33	1.02
C <sub>14</sub> H <sub>9</sub>	15.27	1.08	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.74	0.92	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.11	1.19
178			C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	11.12	0.76	C <sub>12</sub> H <sub>212</sub> N	13.7	0.87
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	7.63	1.06	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	11.49	0.6	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> NO	13.48	1.04
C <sub>6</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.00	0.88	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	11.1	1.16	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	13.86	0.89
C <sub>6</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	8.38	0.71	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	11.47	1	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub>	14.43	0.97
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	8.36	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	11.85	0.84	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> O	14.21	1.13
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	8.73	0.94	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	12.22	0.69	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N	14.59	0.99
C <sub>7</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.52	1.12	C <sub>10</sub> HN <sub>3</sub> O	12.01	0.86	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub>	15.32	1.09



C <sub>15</sub>	16.21	1.23	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	11.15	1.16	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	12.8	0.95
181			C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	11.52	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	13.17	0.8
C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.56	1.13	C <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	11.3	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> O	13.37	1.02
C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.94	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	11.9	0.85	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	13.16	1.2
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.31	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.68	1.02	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N	13.75	0.87
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	9.29	1.19	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	12.27	0.69	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NO	13.53	1.05
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.67	1.02	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	12.05	0.87	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	13.91	0.9
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.04	0.86	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	12.43	0.71	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub>	14.48	0.97
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	10.42	0.69	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	12.25	1.09	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> O	14.29	1.14
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	10.03	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.04	1.26	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N	14.64	0.99
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	10.4	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> NO	12.63	0.93	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub>	15.37	1.1
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.77	0.93	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	12.41	1.11	C <sub>14</sub> HN	15.53	1.12
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	1.15	0.77	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	13	0.78	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub>	16.26	1.23
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	10.52	0.61	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	12.78	0.95	184		
C <sub>9</sub> HN <sub>4</sub> O	11.31	0.78	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	13.16	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.61	1.13
C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	11.13	1.16	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O	13.36	1.02	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.99	0.96
C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	11.51	1	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	13.14	0.19	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.36	0.8
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	11.88	0.85	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N	13.73	0.87	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	9.34	1.19
C <sub>10</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.66	1.02	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> NO	13.52	1.04	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.72	1.03
C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub>	12.25	0.69	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	13.89	0.89	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.09	0.86
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	12.04	0.86	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub>	14.46	0.97	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	10.47	0.7
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	12.41	0.71	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O	14.25	1.14	C <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.25	0.88
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	12.24	1.09	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N	14.62	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	10.07	1.26
C <sub>11</sub> HO <sub>3</sub>	12.02	1.26	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub>	15.35	1.1	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	10.45	1.09
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> NO	12.61	0.93	C <sub>14</sub> N	15.51	1.12	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.82	0.93
C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	12.39	1.1	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub>	16.24	1.23	C <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.61	1.11
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	12.99	0.78	183			C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	11.2	0.77
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	12.77	0.95	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.6	1.13	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.98	0.95
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	13.14	0.8	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.97	0.96	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	11.57	0.61
C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> O	13.34	1.02	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.34	0.79	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	11.35	0.79
C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	13.13	1.19	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	9.33	1.19	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	11.18	1.17
C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N	13.72	0.87	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.7	1.02	C <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	10.96	1.34
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> NO	13.5	1.04	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.08	0.86	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	11.55	1.01
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	13.87	0.89	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	10.45	0.7	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	11.34	1.18
C <sub>13</sub> H <sub>25</sub>	14.45	0.97	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	10.06	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	11.93	0.85
C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> O	14.23	1.14	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	10.43	1.09	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.71	1.03
C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N	14.61	0.99	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.81	0.93	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	12.3	0.7
C <sub>14</sub> H <sub>13</sub>	15.34	1.09	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	11.18	0.77	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	12.09	0.87
C <sub>15</sub> H	16.22	1.23	C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> O <sub>2</sub>	10.76	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	12.46	0.71
182			C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	11.56	0.61	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	12.28	1.09
C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.58	1.13	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	11.34	0.79	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	12.07	1.27
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.95	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	11.16	1.17	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> NO	12.66	0.94
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.33	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	11.54	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	12.44	1.11
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	9.31	1.19	C <sub>10</sub> HNO <sub>3</sub>	11.32	1.18	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	13.03	0.78
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.69	1.02	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	11.91	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	12.82	0.96
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.06	0.86	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.7	1.02	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	13.19	0.8
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	10.43	0.7	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	12.29	0.69	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O	13.39	1.03
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	10.04	1.25	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	12.07	0.87	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	13.17	1.2
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	10.42	1.09	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	12.44	0.71	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N	13.76	0.88
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.79	0.93	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	12.27	1.09	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> NO	13.55	1.05
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	11.16	0.77	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.05	1.26	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	13.92	0.9
C <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.95	0.95	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> NO	12.64	0.93	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	14.5	0.97
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	11.54	0.61	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	12.43	1.11	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O	14.28	1.14
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	11.32	0.79	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	13.02	0.78	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N	14.65	1

C <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	14.81	1.02	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	9.37	1.19	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	10.12	1.26
C <sub>14</sub> H <sub>16</sub>	15.38	1.1	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.75	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>	10.5	1.1
C <sub>14</sub> O	15.17	1.27	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.12	0.86	C <sub>9</sub> HNO <sub>4</sub>	10.28	1.28
C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N	15.54	1.13	C <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.91	1.04	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.87	0.94
C <sub>15</sub> H <sub>4</sub>	16.27	1.24	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O	10.5	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.65	1.21
185			C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.28	0.88	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	11.24	0.78
C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.63	1.13	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	10.11	1.26	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.03	0.95
C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9	0.96	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub>	10.48	1.1	C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub>	11.62	0.62
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.38	0.8	C <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	10.26	1.28	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	11.4	0.8
C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	9.36	1.19	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.85	0.94	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub>	11.23	1.17
C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.73	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.64	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	11.01	1.35
C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.11	0.86	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O	11.23	0.78	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub>	11.6	1.01
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	10.48	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.01	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	11.38	1.19
C <sub>8</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.26	0.88	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub>	11.6	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O	11.98	0.86
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	100.09	1.26	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	11.39	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.76	1.03
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	10.46	1.1	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	11.21	1.17	C <sub>10</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub>	12.35	0.7
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.84	0.93	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.99	1.35	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	12.13	0.88
C <sub>9</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.62	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>2</sub>	11.59	1.01	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	12.51	0.72
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	11.21	0.77	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	11.37	1.19	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> O <sub>2</sub>	12.33	1.1
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	11.96	0.86	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	12.12	1.27
C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	11.59	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.74	1.03	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> NO	12.71	0.94
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	11.37	0.79	C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub>	12.33	0.7	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	12.49	1.12
C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	11.2	1.17	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	12.12	0.87	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	12.86	0.96
C <sub>10</sub> HO <sub>4</sub>	10.98	1.35	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	12.49	0.72	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	13.24	0.81
C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	11.57	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	12.32	1.1	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	13.22	1.2
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	11.35	1.19	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	12.1	1.27	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> NO	13.6	1.05
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	11.94	0.85	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> NO	12.69	0.94	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	13.97	0.9
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.73	1.03	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	12.47	1.11	C <sub>12</sub> HN <sub>3</sub>	14.13	0.93
C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	12.32	0.7	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub>	13.07	0.79	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> O	14.33	1.15
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	12.1	0.87	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	12.85	0.96	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N	14.7	1
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	12.48	0.72	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	13.22	0.81	C <sub>13</sub> HNO	14.48	1.17
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	12.3	1.09	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> O	13.42	1.03	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	14.86	1.03
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	12.08	1.27	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	13.21	1.2	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub>	15.43	1.11
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> NO	12.68	0.94	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> NO	13.58	1.05	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> O	15.22	1.28
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	12.46	1.11	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	13.95	0.9	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N	15.59	1.13
C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	13.05	0.79	C <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	14.11	0.92	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub>	16.32	1.24
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	12.83	0.96	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> O	14.31	1.15	189		
C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	13.21	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N	14.69	1	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.68	1.14
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> O	13.41	1.03	C <sub>13</sub> NO	14.47	1.17	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.05	0.97
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	13.19	1.2	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	14.84	1.02	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.42	0.8
C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N	13.78	0.88	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub>	15.42	1.11	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>4</sub>	9.41	1.2
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO	13.56	1.05	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> O	15.2	1.27	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.78	1.03
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	13.94	0.9	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N	15.57	1.13	C <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.56	1.21
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> O	14.29	1.15	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub>	16.3	1.24	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.16	0.87
C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N	14.67	1	187			C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.94	1.05
C <sub>13</sub> HN <sub>2</sub>	14.83	1.02	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.66	1.13	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O	10.53	0.71
C <sub>14</sub> NH <sub>17</sub>	15.4	1.1	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.03	0.97	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.31	0.88
C <sub>14</sub> HO	15.18	1.27	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.41	0.8	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	10.14	1.26
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N	15.56	1.13	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	9.39	1.2	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>3</sub>	10.51	1.1
C <sub>15</sub> H <sub>5</sub>	16.29	1.24	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.77	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	10.3	1.28
186			C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.14	0.87	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.89	0.94
C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.64	1.13	C <sub>8</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.92	1.04	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.67	1.12
C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.02	0.96	C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O	10.51	0.7	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O	11.26	0.78
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.39	0.8	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.3	0.88	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.04	0.96

C <sub>9</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub>	11.64	0.62	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	12.17	0.88	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	14.02	0.91
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	11.42	0.8	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	12.54	0.72	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	13.8	1.08
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>3</sub>	11.24	1.18	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	12.15	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	14.13	0.93
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	11.03	1.35	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	12.52	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O	14.37	1.16
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>2</sub>	11.62	1.02	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	12.9	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.16	1.33
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	11.4	1.19	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	13.27	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N	14.75	1.01
C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O	11.99	0.86	C <sub>11</sub> HN <sub>4</sub>	13.43	0.83	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> NO	14.53	1.18
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.72	1.03	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	13.25	1.21	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	14.91	1.03
C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	12.15	0.88	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO	13.63	1.06	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub>	15.48	1.12
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	12.52	0.72	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	14	0.91	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> O	15.26	1.28
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	12.35	0.1	C <sub>12</sub> HN <sub>2</sub> O	13.79	1.08	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N	15.64	1.14
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	12.13	1.27	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	14.16	0.93	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub>	16.37	1.25
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	12.51	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> O	14.36	1.16	192		
C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	12.88	0.96	C <sub>13</sub> HO <sub>2</sub>	14.14	1.33	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.72	1.14
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	13.25	0.81	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N	14.73	1.01	C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.1	0.97
C <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	13.4	0.83	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> NO	14.52	1.18	C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.47	0.81
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	13.24	1.21	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	14.89	1.03	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	9.45	1.2
C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> NO	13.61	1.06	C <sub>14</sub> H <sub>21</sub>	15.46	1.11	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.83	1.04
C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	13.99	0.91	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> O	15.25	1.28	C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.61	1.22
C <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	13.77	1.08	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N	15.62	1.14	C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.2	0.87
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	14.14	0.93	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub>	16.35	1.25	C <sub>8</sub> H <sub>65</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.99	1.05
C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> O	14.34	1.15	191			C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.36	0.89
C <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	14.13	1.32	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.71	1.14	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub>	10.19	1.27
C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N	14.72	1.01	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.08	0.97	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	10.56	1.11
C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> NO	14.5	1.18	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.46	0.8	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	10.34	1.28
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	14.87	1.03	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	9.44	1.2	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.72	1.12
C <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	15.45	1.11	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.81	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.09	0.96
C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> O	15.23	1.28	C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.6	1.21	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	11.47	0.8
C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N	15.61	1.14	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.19	0.87	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	11.07	1.36
C <sub>15</sub> H <sub>8</sub>	16.34	1.25	C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.97	1.05	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	11.45	1.2
190			C <sub>8</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O	10.56	0.71	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.82	1.04
C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.69	1.14	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.34	0.89	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	12.2	0.88
C <sub>7</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.07	0.97	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	10.17	1.27	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	12.57	0.73
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.44	0.8	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>3</sub>	10.54	1.1	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	12.18	1.28
C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>	9.42	1.2	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	10.33	1.28	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	12.55	1.12
C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.8	1.03	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.92	0.94	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	12.93	0.97
C <sub>8</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.58	1.21	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.7	1.12	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	13.3	0.82
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.17	0.87	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.08	0.96	C <sub>11</sub> HN <sub>3</sub> O	13.09	0.99
C <sub>8</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.95	1.05	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	11.45	0.8	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	13.46	0.84
C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O	10.55	0.71	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	11.28	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	13.29	1.21
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.33	0.88	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	11.06	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> NO	13.66	1.06
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub>	10.15	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	11.43	1.2	C <sub>12</sub> HNO <sub>2</sub>	13.44	1.23
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	10.53	1.1	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.81	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	14.03	0.91
C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	10.31	1.28	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	12.18	0.88	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	13.82	1.08
C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.9	0.94	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	12.56	0.73	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	14.19	0.93
C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.69	1.12	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	12.16	1.28	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> O	14.39	1.16
C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O	11.28	0.78	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	12.54	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.17	1.33
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.06	0.96	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	12.91	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N	14.77	1.01
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	11.43	0.8	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	13.29	0.82	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> NO	14.55	1.18
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub>	11.26	1.18	C <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	13.07	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	14.92	1.04
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	11.04	1.35	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	13.44	0.84	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub>	15.5	1.12
C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>2</sub>	11.63	1.02	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	13.27	1.21	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> O	15.28	1.29
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	11.42	1.19	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> NO	13.64	1.06	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N	15.65	1.14
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.79	1.04	C <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	13.43	1.23	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub>	16.39	1.25

192			C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	11.5	0.81	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	13.51	0.85
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.74	1.14	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	11.11	1.36	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	13.33	1.22
C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.11	0.97	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	11.48	1.2	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.12	1.39
C <sub>7</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	9.49	0.81	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.86	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> NO	13.71	1.07
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	9.47	1.2	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	12.23	0.89	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	13.49	1.24
C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9.85	1.04	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	12.6	0.73	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	14.08	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.63	1.22	C <sub>10</sub> HN <sub>4</sub> O	12.39	0.91	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	13.87	1.09
C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10	1.05	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	12.21	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	14.24	0.94
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.38	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	12.59	1.13	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> O	14.44	1.17
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	10.2	1.27	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	12.96	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	14.22	1.34
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	10.36	1.29	C <sub>11</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.74	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> N	14.81	1.02
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.73	1.12	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	13.34	0.82	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> NO	14.6	1.19
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.11	0.96	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	13.12	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	14.97	1.04
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	11.48	0.8	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	13.49	0.84	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub>	15.54	1.13
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	11.09	1.36	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	13.32	1.22	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O	15.33	1.29
C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	11.46	1.2	C <sub>12</sub> HO <sub>3</sub>	13.1	1.39	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N	15.7	1.15
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.84	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> NO	13.69	1.07	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub>	16.43	1.26
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	12.21	0.89	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	13.47	1.24	C <sub>15</sub> N	16.59	1.29
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	12.95	0.73	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	14.07	0.92	C <sub>16</sub> H <sub>2</sub>	17.32	1.41
C <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	12.37	0.9	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	13.85	1.09	195		
C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	12.2	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	14.22	0.94	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.68	1.22
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	12.57	1.13	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> O	14.42	1.16	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.05	1.06
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	12.94	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	14.21	1.33	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.42	0.89
C <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.73	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> N	14.8	1.02	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	10.41	1.29
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	13.32	0.82	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> NO	14.58	1.19	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.78	1.13
C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	13.1	0.99	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	14.95	1.04	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.16	0.97
C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	13.48	0.84	C <sub>14</sub> H <sub>25</sub>	15.53	1.12	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	11.53	0.81
C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	13.3	1.22	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> O	15.31	1.29	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	11.14	1.36
C <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	13.08	1.39	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N	15.69	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	11.51	1.21
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> NO	13.68	1.06	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub>	16.42	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.89	1.05
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	13.46	1.24	C <sub>16</sub> H	17.31	1.4	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	12.26	0.89
C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	14.05	0.92	194			C <sub>10</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.04	1.07
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	13.83	1.09	C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.77	1.14	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	12.64	0.74
C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	14.21	0.94	C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.66	1.22	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	12.42	0.91
C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O	14.41	1.16	C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.03	1.06	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	12.24	1.29
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.19	1.33	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.41	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	12.62	1.13
C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> N	14.78	1.02	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	10.39	1.29	C <sub>11</sub> HNO <sub>3</sub>	12.4	1.31
C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> NO	14.56	1.18	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	10.77	1.13	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	12.99	0.98
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	14.94	1.04	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.14	1.3	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.78	1.15
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub>	15.51	1.12	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	11.51	0.97	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	13.37	0.83
C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> O	15.3	1.29	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	11.12	0.81	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	13.15	1
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> N	15.67	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	11.5	1.36	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	13.52	0.85
C <sub>15</sub> H <sub>12</sub>	16.4	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.87	1.2	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	13.25	1.22
C <sub>16</sub>	17.29	1.4	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	12.25	1.05	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.13	1.39
193			C <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.03	0.89	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> NO	13.72	1.07
C <sub>7</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	8.76	1.14	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	12.62	1.06	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> NO	13.51	1.24
C <sub>7</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	9.13	0.98	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	12.4	0.73	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	14.1	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>	9.49	1.2	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	12.23	0.91	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	13.88	1.09
C <sub>8</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.64	1.22	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	12.6	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	14.26	0.94
C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.02	1.05	C <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	12.39	1.13	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> O	14.45	1.17
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.39	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	12.98	0.98	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	14.24	1.34
C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	10.38	1.29	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.76	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N	14.83	1.02
C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.75	1.13	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	13.35	0.82	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> NO	14.61	1.19
C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.12	0.96	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	13.13	1	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	14.99	1.05

C <sub>14</sub> H <sub>27</sub>	15.56	1.13	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.08	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	11.19	1.37
C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> O	15.34	1.3	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.46	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub>	11.56	1.21
C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N	15.72	1.15	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	10.44	1.29	C <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	11.34	1.39
C <sub>15</sub> H <sub>15</sub>	16.45	1.27	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.81	1.13	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.94	1.05
C <sub>15</sub> HN	16.61	1.29	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.19	0.97	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.72	1.23
C <sub>16</sub> H <sub>3</sub>	17.34	1.41	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	11.56	0.81	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O	12.31	0.9
196			C <sub>9</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.35	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.09	1.07
C <sub>8</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.69	1.22	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	11.17	1.37	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub>	12.68	0.74
C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.07	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	11.54	1.21	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	12.47	0.92
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.44	0.96	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.92	1.05	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	12.29	1.29
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	10.42	1.29	C <sub>10</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.7	1.23	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.07	1.47
C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.8	1.13	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	12.29	0.9	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>2</sub>	12.67	1.14
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.17	0.97	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.08	1.07	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	12.45	1.31
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.55	0.81	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	12.67	0.74	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	13.04	0.99
C <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.33	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	12.45	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.82	1.16
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	11.15	1.37	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	12.28	1.29	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub>	13.42	0.83
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	11.53	1.21	C <sub>11</sub> HO <sub>4</sub>	12.06	1.46	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	13.2	1.01
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.9	1.05	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	12.65	1.14	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	13.57	0.85
C <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.69	1.22	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	12.43	1.31	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	13.4	1.23
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	12.28	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	13.02	0.98	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	13.18	1.4
C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.06	1.07	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.81	1.16	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> NO	13.77	1.08
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	12.65	0.74	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	13.4	0.83	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	13.55	1.25
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	12.43	0.91	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	13.18	1	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub>	14.15	0.93
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	12.26	1.29	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	13.56	0.85	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	13.93	1.1
C <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	12.04	1.46	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	13.38	1.23	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	14.3	0.95
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	12.63	1.13	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	13.16	1.4	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O	14.5	1.18
C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	12.42	1.31	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> NO	13.76	1.08	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	14.29	1.35
C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	13.01	0.98	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	13.54	1.25	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> N	14.88	1.03
C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.79	1.15	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	14.13	0.93	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> NO	14.66	1.2
C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	13.38	0.83	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	13.91	1.1	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	15.03	1.05
C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	13.17	1	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	14.29	0.95	C <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	15.19	1.08
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	13.54	0.85	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> O	14.49	1.17	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	15.61	1.14
C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	13.37	1.22	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	14.27	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O	15.39	1.3
C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	13.15	1.4	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> N	14.86	1.03	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N	15.77	1.16
C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> NO	13.74	1.07	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> NO	14.64	1.2	C <sub>14</sub> NO	15.55	1.33
C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	13.52	1.24	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	15.02	1.05	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	15.92	1.18
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	14.11	0.92	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	15.59	1.13	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub>	16.5	1.27
C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	13.9	1.09	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> O	15.38	1.3	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> O	16.28	1.44
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	14.27	0.95	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N	15.75	1.16	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> N	16.65	1.3
C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> O	14.47	1.17	C <sub>14</sub> HN <sub>2</sub>	15.91	1.18	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub>	17.39	1.42
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	14.25	1.34	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub>	16.48	1.27	199		
C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> N	14.85	1.03	C <sub>15</sub> HO	16.26	1.44	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.74	1.23
C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> NO	14.63	1.19	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> N	16.64	1.3	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.11	1.06
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	15	1.05	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub>	17.37	1.42	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.49	0.9
C <sub>14</sub> H <sub>28</sub>	15.58	1.13	198			C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	10.47	1.3
C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O	15.36	1.3	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.72	1.23	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.85	1.14
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N	15.73	1.16	C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.1	1.06	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.22	0.98
C <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	15.89	1.18	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.47	0.9	C <sub>9</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11	1.15
C <sub>15</sub> H <sub>16</sub>	16.47	1.27	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	10.46	1.3	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O	11.59	0.82
C <sub>15</sub> O	16.25	1.43	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.83	1.13	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.38	0.99
C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> N	16.62	1.29	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.2	0.97	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	11.2	1.37
C <sub>16</sub> H <sub>4</sub>	17.35	1.41	C <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.99	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>	11.58	1.21
197			C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O	11.58	0.82	C <sub>10</sub> HNO <sub>4</sub>	11.36	1.39
C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.71	1.22	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.36	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.95	1.06

C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.73	1.23	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O	12.5	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	12.12	1.47
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	12.33	0.9	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> O <sub>3</sub>	12.32	1.3	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>2</sub>	12.71	1.14
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.11	1.07	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	12.11	1.47	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	12.5	1.32
C <sub>10</sub> H <sub>29</sub> N <sub>4</sub>	12.7	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>2</sub>	12.7	1.14	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O	13.09	0.99
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	12.48	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>3</sub>	12.48	1.32	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.87	1.16
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub>	12.31	1.29	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O	13.07	0.99	C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub>	13.46	0.84
C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	12.09	1.47	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.86	1.16	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	13.25	1.01
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub>	12.68	1.14	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub>	13.45	0.84	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	13.62	0.86
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	12.74	1.31	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O	13.23	1.01	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> O <sub>2</sub>	13.45	1.23
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O	13.06	0.99	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub>	13.6	0.86	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	13.23	1.41
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.84	1.16	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	13.43	1.23	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> NO	13.82	1.08
C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub>	13.43	0.84	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O <sub>3</sub>	13.21	1.4	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	13.6	1.26
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	13.21	1.01	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> NO	13.8	1.08	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	13.98	1.11
C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	13.59	0.86	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>2</sub>	13.59	1.25	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	14.35	0.96
C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> O <sub>2</sub>	13.41	1.23	C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub>	14.18	0.93	C <sub>12</sub> HN <sub>4</sub>	14.51	0.98
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	13.2	1.4	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	13.96	1.1	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	14.33	1.35
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> NO	13.79	1.08	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	14.34	0.96	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> NO	14.71	1.21
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	13.57	1.25	C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	14.49	0.98	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	15.08	1.06
C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub>	14.16	0.93	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> O	14.53	1.18	C <sub>13</sub> HN <sub>2</sub> O	14.87	1.23
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	13.95	1.1	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	14.32	1.35	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	15.24	1.08
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	14.32	0.95	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> NO	14.69	1.2	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> O	15.44	1.31
C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> O	14.52	1.18	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	15.07	1.06	C <sub>14</sub> HO <sub>2</sub>	15.22	1.48
C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	14.3	1.35	C <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	14.85	1.23	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N	15.81	1.17
C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> N	14.89	1.03	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	15.22	1.08	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> NO	15.6	1.33
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> NO	14.68	1.2	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> O	15.42	1.31	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	15.97	1.19
C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	15.05	1.06	C <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	15.21	1.48	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub>	16.55	1.28
C <sub>13</sub> HN <sub>3</sub>	15.21	1.08	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N	15.8	1.17	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> O	16.33	1.45
C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> O	15.41	1.31	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> NO	15.58	1.33	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N	16.7	1.31
C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N	15.78	1.16	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	15.96	1.19	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub>	17.43	1.43
C <sub>14</sub> HNO	15.56	1.33	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub>	16.53	1.28	202		
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	15.94	1.19	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> O	16.31	1.44	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.79	1.23
C <sub>15</sub> H <sub>19</sub>	16.51	1.28	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> N	16.69	1.3	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.16	1.07
C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> O	16.3	1.44	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub>	17.42	1.42	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.54	0.91
C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> N	16.67	1.3	201			C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	10.52	1.3
C <sub>16</sub> H <sub>7</sub>	17.4	1.42	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.77	1.23	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.89	1.14
200			C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.15	1.07	C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.68	1.32
C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.76	1.23	C <sub>8</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.52	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.27	0.98
C <sub>8</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.13	1.07	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>	10.5	1.3	C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.05	1.16
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.5	0.9	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.88	1.14	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O	11.64	0.82
C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>4</sub>	10.49	1.3	C <sub>9</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.66	1.32	C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.43	1
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.86	1.14	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	10.25	0.98	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	11.25	1.38
C <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.64	1.31	C <sub>9</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.04	1.16	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>3</sub>	11.62	1.22
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	11.24	0.98	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O	11.63	0.82	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	11.41	1.39
C <sub>9</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.02	1.15	C <sub>9</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.41	1	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12	1.06
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O	11.61	0.82	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub>	11.23	1.37	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.78	1.24
C <sub>9</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.39	0.99	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	11.61	1.22	C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O	12.37	0.91
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> O <sub>4</sub>	11.22	1.37	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	11.39	1.39	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.16	1.08
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>3</sub>	11.59	1.21	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.98	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub>	12.75	0.75
C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>4</sub>	11.38	1.39	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.77	1.23	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	12.53	0.92
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	11.97	1.06	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O	12.36	0.9	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	12.36	1.3
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.75	1.23	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.14	1.08	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	12.14	1.47
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O	12.34	0.9	C <sub>10</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub>	12.73	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>2</sub>	12.73	1.15
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.12	1.08	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	12.51	0.92	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	12.51	1.32
C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub>	12.72	0.75	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub>	12.34	1.3	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O	13.1	0.99

$C_{11}H_{10}N_2O_2$	12.89	1.17	$C_{12}H_{17}N_3$	14.38	0.96	$C_{13}H_{20}N_2$	15.13	1.07
$C_{11}H_{12}N_3O$	13.26	1.01	$C_{12}HN_3O$	14.17	1.13	$C_{13}H_4N_2O$	14.91	1.24
$C_{11}H_{14}N_4$	13.64	0.86	$C_{12}H_3N_4$	14.54	0.98	$C_{13}H_6N_3$	15.29	1.09
$C_{12}H_{26}O_2$	13.46	1.24	$C_{13}H_{15}O_2$	14.37	1.36	$C_{14}H_{20}O$	15.49	1.32
$C_{12}H_{10}O_3$	13.24	1.41	$C_{13}H_{17}NO$	14.74	1.21	$C_{14}H_4O_2$	15.27	1.49
$C_{12}H_{12}NO_2$	13.62	1.26	$C_{13}HNO_2$	14.52	1.38	$C_{14}H_{22}N$	15.86	1.18
$C_{12}H_{14}N_2O$	13.99	1.11	$C_{13}H_{19}N_2$	15.11	1.06	$C_{14}H_6NO$	15.64	1.34
$C_{12}H_{16}N_3$	14.37	0.96	$C_{13}H_3N_2O$	14.9	1.23	$C_{14}H_8N_2$	16.02	1.2
$C_{12}N_3O$	14.15	1.13	$C_{13}H_5N_3$	15.27	1.09	$C_{15}H_{24}$	16.59	1.29
$C_{12}H_2N_4$	14.53	0.98	$C_{14}H_{19}O$	15.47	1.32	$C_{15}H_8O$	16.38	1.45
$C_{13}H_{14}O_2$	14.35	1.35	$C_{14}H_3O_2$	15.25	1.48	$C_{15}H_{10}N$	16.75	1.31
$C_{13}H_{16}NO$	14.72	1.21	$C_{14}H_{21}N$	15.85	1.17	$C_{16}H_{12}$	17.48	1.43
$C_{13}NO_2$	14.51	1.38	$C_{14}H_5NO$	15.63	1.34	$C_{17}$	18.37	1.59
$C_{13}H_{18}N_2$	15.1	1.06	$C_{14}H_7N_2$	16	1.2	205		
$C_{13}H_2N_2O$	14.88	1.23	$C_{15}H_{23}$	16.58	1.29	$C_8H_{17}N_2O_4$	9.84	1.24
$C_{13}H_4N_3$	15.26	1.09	$C_{15}H_7O$	16.36	1.45	$C_8H_{19}N_3O_3$	10.21	1.07
$C_{14}H_{18}O$	15.46	1.31	$C_{15}H_{89}N$	16.73	1.31	$C_8H_{21}N_4O_2$	10.58	0.91
$C_{14}H_2O_2$	15.24	1.48	$C_{16}H_{11}$	17.47	1.43	$C_9H_{19}NO_4$	10.57	1.31
$C_{14}H_{20}N$	15.83	1.17	204			$C_9H_{21}N_2O_3$	10.54	1.15
$C_{14}H_4NO$	15.61	1.34	$C_8H_{16}N_2O_4$	9.82	1.24	$C_9H_5N_2O_4$	10.72	1.32
$C_{14}H_6N_2$	15.99	1.19	$C_8H_{18}N_3O_3$	10.19	1.07	$C_9H_{23}N_3O_2$	11.32	0.99
$C_{15}H_{22}$	16.56	1.28	$C_8H_{20}N_4O_2$	10.57	0.91	$C_9H_7N_3O_3$	11.1	1.16
$C_{15}H_6O$	16.34	1.45	$C_9H_{18}NO_4$	10.55	1.31	$C_9H_9N_4O_2$	11.47	1
$C_{15}H_8N$	16.72	1.31	$C_9H_2O N_2O_3$	10.93	1.14	$C_{10}H_{21}O_4$	11.3	1.38
$C_{16}H_{10}$	17.45	1.43	$C_9H_4N_2O_4$	10.71	1.32	$C_{10}H_{23}NO_3$	11.67	1.22
203			$C_9H_{22}N_3O_2$	11.3	0.98	$C_{10}H_7NO_4$	11.46	1.4
$C_8H_{15}N_2O_4$	9.8	1.23	$C_9H_6N_3O_3$	11.08	1.16	$C_{10}H_9N_2O_3$	11.83	1.24
$C_8H_{17}N_3O_3$	10.18	1.07	$C_9H_{24}N_4O$	11.67	0.83	$C_{10}H_{11}N_3O_2$	12.2	1.09
$C_8H_{19}N_4O_2$	10.55	0.91	$C_9H_8N_4O_2$	11.46	1	$C_{10}H_{13}N_4O$	12.58	0.93
$C_9H_{17}NO_4$	10.54	1.3	$C_{10}H_{20}O_4$	11.28	1.38	$C_{11}H_9O_4$	12.19	1.48
$C_9H_{19}N_2O_3$	10.91	1.14	$C_{10}H_{22}NO_3$	11.66	1.22	$C_{11}H_{11}NO_3$	12.56	1.33
$C_9H_3N_2O_4$	10.69	1.32	$C_{10}H_6NO_4$	11.44	1.4	$C_{11}H_{13}N_2O_2$	12.94	1.17
$C_9H_{21}N_3O_2$	11.28	0.98	$C_{10}H_{24}N_2O_2$	12.03	1.06	$C_{11}H_{15}N_3O$	13.31	1.02
$C_9H_5N_3O_3$	11.07	1.16	$C_{10}H_8N_2O_3$	11.81	1.24	$C_{11}H_{17}N_4$	13.68	0.87
$C_9H_{23}N_4O$	11.66	0.82	$C_{10}H_{10}N_3O_2$	12.19	1.08	$C_{11}HN_4O$	13.47	1.04
$C_9H_7N_4O_2$	11.44	1	$C_{10}H_{12}N_4O$	12.56	0.93	$C_{12}H_{13}O_3$	13.29	1.41
$C_{10}H_{19}O_4$	11.27	1.38	$C_{11}H_{24}O_3$	12.39	1.3	$C_{12}H_{15}NO_2$	13.67	1.26
$C_{10}H_{21}NO_3$	11.64	1.22	$C_{11}H_8O_4$	12.17	1.48	$C_{12}H_{17}N_2O$	14.04	1.11
$C_{10}H_5NO_4$	11.42	1.4	$C_{11}H_{10}NO_3$	12.55	1.32	$C_{12}HN_2O_2$	13.82	1.28
$C_{10}H_{23}N_2O_2$	12.02	1.06	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	12.92	1.17	$C_{12}H_{19}N_3$	14.42	0.97
$C_{10}H_7N_2O_3$	11.8	1.24	$C_{11}H_{14}N_3O$	13.29	1.02	$C_{12}H_3N_3O$	14.2	1.14
$C_{10}H_{25}N_3O$	12.39	0.91	$C_{11}H_{16}N_4$	13.67	0.87	$C_{12}H_5N_4$	14.57	0.99
$C_{10}H_9N_3O_2$	12.17	1.08	$C_{11}N_4O$	13.45	1.04	$C_{13}H_{17}O_2$	14.4	1.36
$C_{10}H_{11}N_4O$	12.55	0.83	$C_{12}H_{12}O_3$	13.28	1.41	$C_{13}HO_3$	14.18	1.53
$C_{11}H_{23}O_3$	12.37	1.3	$C_{12}H_{14}NO_2$	13.65	1.26	$C_{13}H_{19}NO$	14.77	1.21
$C_{11}H_7O_4$	12.15	1.48	$C_{12}H_{16}N_2O$	14.03	1.11	$C_{13}H_3NO_2$	14.56	1.38
$C_{11}H_{25}NO_2$	12.75	1.15	$C_{12}N_2O_2$	13.81	1.28	$C_{13}H_{21}N_2$	15.15	1.07
$C_{11}H_9NO_3$	12.53	1.32	$C_{12}H_{18}N_3$	14.4	0.96	$C_{13}H_5N_2O$	14.93	1.24
$C_{11}H_{11}N_2O_2$	12.9	1.17	$C_{12}H_2N_3O$	14.18	1.13	$C_{13}H_7N_3$	15.3	1.09
$C_{11}H_{13}N_3O$	13.28	1.02	$C_{12}H_4N_4$	14.56	0.99	$C_{14}H_{21}O$	15.5	1.32
$C_{11}H_{15}N_4$	13.65	0.86	$C_{13}H_{16}O_2$	14.38	1.36	$C_{14}H_5O_2$	15.29	1.49
$C_{12}H_{11}O_3$	13.26	1.41	$C_{13}O_3$	14.17	1.53	$C_{14}H_{23}N$	15.88	1.18
$C_{12}H_{13}NO_2$	13.63	1.26	$C_{13}H_{16}NO$	14.76	1.21	$C_{14}H_7NO$	15.66	1.34
$C_{12}H_{15}N_2O$	14.01	1.11	$C_{13}H_2NO_2$	14.54	1.38	$C_{14}H_9N_2$	16.04	1.2

C <sub>15</sub> H <sub>25</sub>	16.61	1.29	C <sub>8</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.24	1.08	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.98	1.18
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> O	16.39	1.46	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	10.6	1.31	C <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.77	1.35
C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> N	16.77	1.32	C <sub>9</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.76	1.33	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	13.36	1.03
C <sub>16</sub> H <sub>13</sub>	17.5	1.44	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.13	1.17	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.14	1.2
C <sub>17</sub> H	18.39	1.59	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.51	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	13.73	0.88
206			C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	11.49	1.4	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	13.52	1.05
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.85	1.24	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.86	1.25	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	13.34	1.42
C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	10.23	1.08	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.24	1.09	C <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	13.12	1.59
C <sub>8</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	10.6	0.91	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	12.61	0.93	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	13.71	1.27
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>4</sub>	10.58	1.31	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	12.22	1.48	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	13.5	1.44
C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10.96	1.15	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	12.59	1.33	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	14.09	1.12
C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.74	1.32	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.97	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.87	1.29
C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.12	1.16	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	13.34	1.02	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	14.46	0.97
C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.49	1.01	C <sub>11</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.13	1.2	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	14.25	1.14
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	11.31	1.38	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	13.72	0.87	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	14.62	1
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	11.47	1.4	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	13.5	1.04	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	14.45	1.37
C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.85	1.24	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	13.32	1.42	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	14.23	1.54
C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.22	1.09	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	13.7	1.27	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> NO	14.82	1.22
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	12.59	0.93	C <sub>12</sub> HNO <sub>3</sub>	13.48	1.44	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	14.6	1.39
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	12.2	1.48	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	14.07	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	15.19	1.08
C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	12.58	1.33	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.86	1.29	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	14.98	1.24
C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	12.95	1.17	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	14.45	0.97	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	15.35	1.1
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	13.33	1.02	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	14.23	1.14	C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> O	15.55	1.33
C <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.11	1.19	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	14.61	0.99	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	15.33	1.49
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	13.7	0.87	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	14.43	1.37	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> N	15.93	1.19
C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	13.48	1.04	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.21	1.54	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> NO	15.71	1.35
C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	13.31	1.42	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> NO	14.8	1.22	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	16.08	1.21
C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	13.68	1.27	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	14.59	1.39	C <sub>15</sub> H <sub>28</sub>	16.66	1.3
C <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	13.47	1.44	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	15.18	1.07	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O	16.44	1.46
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	14.06	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	14.96	1.24	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N	16.81	1.33
C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.84	1.29	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	15.34	1.1	C <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	16.97	1.35
C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	14.43	0.97	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> O	15.54	1.33	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub>	17.55	1.45
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	14.21	1.14	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	15.32	1.49	C <sub>16</sub> O	17.33	1.61
C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	14.59	0.99	C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> N	15.91	1.18	C <sub>16</sub> H <sub>2</sub> N	17.7	1.47
C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	14.41	1.36	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> NO	15.69	1.35	C <sub>17</sub> H <sub>4</sub>	18.43	1.6
C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.2	1.53	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	16.07	1.21	209		
C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> NO	14.79	1.22	C <sub>15</sub> H <sub>27</sub>	16.64	1.3	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.79	1.33
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	14.57	1.39	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> O	16.42	1.46	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.16	1.17
C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	15.16	1.07	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N	16.8	1.32	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.54	1.01
C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	14.95	1.24	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub>	17.53	1.44	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	11.52	1.41
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	15.32	1.1	C <sub>16</sub> HN	17.69	1.47	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.89	1.25
C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O	15.52	1.32	C <sub>16</sub> H <sub>3</sub>	18.42	1.6	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.27	1.09
C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	15.3	1.49	208			C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	12.64	0.94
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> N	15.89	1.18	C <sub>8</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.88	1.24	C <sub>10</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.43	1.11
C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> NO	15.68	1.35	C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.77	1.33	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	12.25	1.49
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	16.05	1.21	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.15	1.17	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	12.63	1.33
C <sub>15</sub> H <sub>26</sub>	16.63	1.29	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.52	1.01	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13	1.18
C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O	16.41	1.46	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	11.5	1.4	C <sub>11</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.78	1.35
C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> N	16.78	1.32	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.82	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	13.37	1.03
C <sub>16</sub> H <sub>14</sub>	17.51	1.44	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.25	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.16	1.2
C <sub>16</sub> N	17.67	1.47	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	12.63	0.94	C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> 1N <sub>4</sub>	13.75	0.88
C <sub>17</sub> H <sub>2</sub>	18.4	1.59	C <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.41	1.11	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	13.53	1.05
207			C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	12.24	1.49	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	13.36	1.42
C <sub>8</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	9.87	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	12.61	1.33	C <sub>12</sub> HO <sub>4</sub>	13.14	1.6



$C_{12}H_{19}NO_2$	13.73	1.27	$C_{12}H_{10}N_4$	14.65	1.00	$C_{13}H_9NO_2$	14.65	1.40
$C_{12}H_3NO_3$	13.51	1.44	$C_{13}H_{22}O_2$	14.48	1.37	$C_{13}H_{27}N_2$	15.24	1.08
$C_{12}H_{21}N_2O$	14.11	1.12	$C_{13}H_6O_3$	14.26	1.54	$C_{13}H_{11}N_2O$	15.03	1.25
$C_{12}H_5N_2O_2$	13.89	1.29	$C_{13}H_{24}NO$	14.85	1.23	$C_{13}H_{13}N_3$	15.40	1.11
$C_{12}H_{23}N_3$	14.48	0.98	$C_{13}H_8NO_2$	14.64	1.40	$C_{14}H_{27}O$	15.60	1.34
$C_{12}H_7N_3O$	14.26	1.15	$C_{13}H_{26}N_2$	15.23	1.08	$C_{14}H_{11}O_2$	15.38	1.50
$C_{12}H_9N_4$	14.64	1.00	$C_{13}H_{10}N_2O$	15.01	1.25	$C_{14}H_{29}N$	15.97	1.19
$C_{13}H_{21}O_2$	14.46	1.37	$C_{13}H_{12}N_3$	15.38	1.11	$C_{14}H_{13}NO$	15.76	1.36
$C_{13}H_5O_3$	14.25	1.54	$C_{14}H_{26}O$	15.58	1.33	$C_{14}H_{15}N_2$	16.13	1.22
$C_{13}H_{23}NO$	14.84	1.22	$C_{14}H_{10}O_2$	15.37	1.50	$C_{14}HN_3$	16.29	1.24
$C_{13}H_7NO_2$	14.62	1.39	$C_{14}H_{28}N$	15.96	1.19	$C_{15}H_{31}$	16.71	1.31
$C_{13}H_{25}N_2$	15.21	1.09	$C_{14}H_{12}NO$	15.74	1.36	$C_{15}H_{15}O$	16.49	1.47
$C_{13}H_9N_2O$	14.99	1.25	$C_{14}H_{14}N_2$	16.12	1.22	$C_{15}H_{17}N$	16.86	1.33
$C_{13}H_{11}N_3$	15.37	1.10	$C_{14}N_3$	16.27	1.24	$C_{15}HNO$	16.65	1.50
$C_{14}H_{25}O$	15.57	1.33	$C_{15}H_{30}$	16.69	1.31	$C_{15}H_3N_2$	17.02	1.36
$C_{14}H_9O_2$	15.35	1.50	$C_{15}H_{14}O$	16.47	1.47	$C_{16}H_{19}$	17.59	1.45
$C_{14}H_{27}N$	15.94	1.19	$C_{15}H_{16}N$	16.85	1.33	$C_{16}H_3O$	17.38	1.62
$C_{14}H_{11}NO$	15.72	1.35	$C_{15}NO$	16.63	1.49	$C_{16}H_5N$	17.75	1.48
$C_{14}H_{13}N_2$	16.10	1.21	$C_{15}H_2N_2$	17.00	1.36	$C_{17}H_{17}$	18.48	1.61
$C_{15}H_{29}$	16.67	1.30	$C_{16}H_{18}$	17.58	1.45	212		
$C_{15}H_{13}O$	16.46	1.47	$C_{16}H_2O$	17.36	1.61	$C_9H_{12}N_2O_4$	10.84	1.34
$C_{15}H_{15}N$	16.83	1.33	$C_{16}H_4N$	17.74	1.48	$C_9H_{14}N_3O_3$	11.21	1.18
$C_{15}HN_2$	16.99	1.35	$C_{17}H_6$	18.47	1.61	$C_9H_{16}N_4O_2$	11.59	1.02
$C_{16}H_{17}$	17.56	1.45	211		$C_{10}H_{14}NO_4$	11.57	1.41	
$C_{16}HO$	17.37	1.61	$C_9H_{11}N_2O_4$	10.82	1.33	$C_{10}H_{16}N_2O_3$	11.94	1.25
$C_{16}H_3N$	17.72	1.48	$C_9H_{13}N_3O_3$	11.20	1.17	$C_{10}N_2O_4$	11.73	1.43
$C_{17}H_5$	18.45	1.60	$C_9H_{15}N_4O_2$	11.57	1.01	$C_{10}H_{18}N_3O_2$	12.32	1.10
210			$C_{10}H_{13}NO_4$	11.55	1.41	$C_{10}H_{20}N_4O$	12.10	1.27
$C_9H_{10}N_2O_4$	10.80	1.33	$C_{10}H_{15}N_2O_3$	11.93	1.25	$C_{10}H_4N_4O$	12.69	0.94
$C_9H_{12}N_3O_3$	11.18	1.17	$C_{10}H_{17}N_3O_2$	12.30	1.10	$C_{11}H_{16}O_4$	12.30	1.49
$C_9H_{14}N_4O_2$	11.55	1.01	$C_{10}HN_3O_3$	12.08	1.27	$C_{11}H_{18}NO_3$	12.67	1.34
$C_{10}H_{12}NO_4$	11.54	1.41	$C_{10}H_{19}N_4O$	12.67	0.94	$C_{11}H_2NO_4$	12.46	1.51
$C_{10}H_{14}N_2O_3$	11.91	1.25	$C_{10}H_3N_4O_2$	12.46	1.12	$C_{11}H_{20}N_2O_2$	13.05	1.19
$C_{10}H_{16}N_3O_2$	12.28	1.09	$C_{11}H_{15}O_4$	12.28	1.49	$C_{11}H_4N_2O_3$	12.83	1.36
$C_{10}N_3O_3$	12.07	1.27	$C_{11}H_{17}NO_3$	12.66	1.34	$C_{11}H_{22}N_3O$	13.42	1.03
$C_{10}H_{18}N_4O$	12.66	0.94	$C_{11}HNO_4$	12.44	1.51	$C_{11}H_6N_3O_2$	13.21	1.21
$C_{10}H_2N_4O_2$	12.44	1.11	$C_{11}H_{19}N_2O_2$	13.03	1.18	$C_{11}H_{24}N_4$	13.80	0.88
$C_{11}H_{14}O_4$	12.27	1.49	$C_{11}H_3N_2O_3$	12.81	1.36	$C_{11}H_8N_4O$	13.58	1.06
$C_{11}H_{16}NO_3$	12.64	1.34	$C_{11}H_{21}N_3O$	13.41	1.03	$C_{12}H_{20}O_3$	13.40	1.43
$C_{11}NO_4$	12.42	1.51	$C_{11}H_5N_3O_2$	13.19	1.20	$C_{12}H_4O_4$	13.19	1.60
$C_{11}H_{18}N_2O_2$	13.02	1.18	$C_{11}H_{23}N_4$	13.78	0.88	$C_{12}H_{22}NO_2$	13.78	1.28
$C_{11}H_2N_2O_3$	12.80	1.35	$C_{11}H_7N_4O$	13.56	1.05	$C_{12}H_6NO_3$	13.56	1.45
$C_{11}H_{20}N_3O$	13.39	1.03	$C_{12}H_{19}O_3$	13.39	1.43	$C_{12}H_{24}N_2O$	14.15	1.13
$C_{11}H_4N_3O_2$	13.17	1.20	$C_{12}H_3O_4$	13.17	1.60	$C_{12}H_8N_2O_2$	13.94	1.30
$C_{11}H_{22}N_4$	13.76	0.88	$C_{12}H_{21}NO_2$	13.76	1.28	$C_{12}H_{26}N_3$	14.53	1.98
$C_{11}H_6N_4O$	13.55	1.05	$C_{12}H_5NO_3$	13.55	1.45	$C_{12}H_{10}N_3O$	14.31	1.15
$C_{12}H_{18}O_3$	13.37	1.43	$C_{12}H_{23}N_2O$	14.14	1.13	$C_{12}H_{12}N_4$	14.69	1.01
$C_{12}H_2O_4$	13.16	1.60	$C_{12}H_7N_2O_2$	13.90	1.30	$C_{13}H_{24}O_2$	14.51	1.38
$C_{12}H_{20}NO_2$	13.75	1.28	$C_{12}H_{25}N_3$	14.51	0.98	$C_{13}H_8O_3$	14.29	1.55
$C_{12}H_4NO_3$	13.53	1.45	$C_{12}H_9N_3O$	14.29	1.15	$C_{13}H_{26}NO$	14.88	1.23
$C_{12}H_{22}N_2O$	14.12	1.13	$C_{12}H_{11}N_4$	14.67	1.00	$C_{13}H_{10}NO_2$	14.67	1.40
$C_{12}H_6N_2O_2$	13.90	1.30	$C_{13}H_{23}O_2$	14.49	1.38	$C_{13}H_{28}N_2$	15.26	1.09
$C_{12}H_{24}N_3$	14.50	0.98	$C_{13}H_7O_3$	14.28	1.54	$C_{13}H_{12}N_2O$	15.04	1.25
$C_{12}H_8N_3O$	14.28	1.15	$C_{13}H_{25}NO$	14.87	1.23	$C_{13}H_{14}N_3$	15.42	1.11

C <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	15.57	1.13	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	15.41	1.51	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> NO	15.80	1.37
C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O	15.62	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> N	16.01	1.20	C <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	15.59	1.53
C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub>	15.40	1.50	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> NO	15.79	1.36	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	16.18	1.23
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> N	15.99	1.20	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	16.16	1.22	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	15.96	1.39
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> NO	15.77	1.36	C <sub>14</sub> HN <sub>2</sub> O	15.95	1.39	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	16.34	1.25
C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	16.15	1.22	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	16.32	1.25	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> O	16.54	1.48
C <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	15.93	1.39	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> O	16.52	1.48	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.32	1.64
C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	16.30	1.25	C <sub>15</sub> HO <sub>2</sub>	16.30	1.64	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> N	16.91	1.34
C <sub>15</sub> H <sub>23</sub>	16.72	1.31	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> N	16.89	1.34	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> NO	16.69	1.51
C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> O	16.50	1.47	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> NO	16.68	1.60	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	17.07	1.37
C <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	16.29	1.64	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	17.05	1.36	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub>	17.64	1.46
C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> N	16.88	1.34	C <sub>16</sub> H <sub>21</sub>	17.63	1.46	C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> O	17.42	1.63
C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> NO	16.66	1.50	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> O	17.41	1.62	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> N	17.80	1.49
C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	17.04	1.36	C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> N	17.78	1.49	C <sub>17</sub> H <sub>10</sub>	18.53	1.62
C <sub>16</sub> H <sub>20</sub>	17.61	1.46	C <sub>17</sub> H <sub>9</sub>	18.51	1.61	215		
C <sub>16</sub> H <sub>4</sub> O	17.39	1.62	214			C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.88	1.34
C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> N	17.77	1.48	C <sub>9</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.87	1.34	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.26	1.18
C <sub>17</sub> H <sub>8</sub>	18.50	1.61	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.24	1.18	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.63	1.02
213			C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.62	1.02	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	11.62	1.42
C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.85	1.34	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	11.60	1.42	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.99	1.26
C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.23	1.18	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	11.97	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.77	1.44
C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.60	1.02	C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.76	1.43	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.36	1.10
C <sub>10</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.74	1.43	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.35	1.10	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.15	1.28
C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.33	1.10	C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.13	1.18	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub> O	12.74	0.95
C <sub>10</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.12	1.27	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O	12.72	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.52	1.12
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O	12.71	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.51	1.12	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub>	12.35	1.50
C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.49	1.12	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	12.33	1.50	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	12.72	1.35
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub>	12.32	1.50	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>3</sub>	12.71	1.34	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	12.50	1.52
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	12.69	1.34	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	12.49	1.52	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.10	1.19
C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	12.47	1.51	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.08	1.19	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.88	1.37
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.06	1.19	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.86	1.36	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O	13.47	1.04
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.85	1.36	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O	13.45	1.04	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.25	1.21
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O	13.44	1.04	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.24	1.21	C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub>	13.84	0.89
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.22	1.21	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub>	13.83	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	13.63	1.06
C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub>	13.81	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	13.61	1.06	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> O <sub>3</sub>	13.45	1.44
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	13.60	1.06	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	13.44	1.43	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	13.24	1.61
C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub>	13.42	1.43	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	13.22	1.61	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>2</sub>	13.83	1.29
C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	13.20	1.60	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>2</sub>	13.81	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	13.61	1.46
C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>2</sub>	13.79	1.28	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	13.59	1.45	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub> O	14.20	1.14
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	13.58	1.45	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O	14.19	1.14	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.98	1.31
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O	14.17	1.13	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.97	1.30	C <sub>12</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub>	14.58	0.99
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.95	1.30	C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub>	14.56	0.99	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	14.36	1.16
C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub>	14.54	0.99	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	14.34	1.16	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	14.73	1.01
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	14.33	1.15	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	14.72	1.01	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> O <sub>2</sub>	14.56	1.38
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	14.70	1.01	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	14.54	1.38	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	14.34	1.55
C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> O <sub>2</sub>	14.53	1.38	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	14.33	1.55	C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> NO	14.93	1.24
C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	14.31	1.55	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> NO	14.92	1.24	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	14.72	1.41
C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> NO	14.90	1.23	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	14.70	1.40	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	15.09	1.26
C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	14.68	1.40	C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub>	15.29	1.09	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	15.46	1.12
C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub>	15.27	1.09	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	15.07	1.26	C <sub>13</sub> HN <sub>3</sub> O	15.25	1.28
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	15.06	1.26	C <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	15.23	1.28	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	15.62	1.14
C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	15.43	1.11	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	15.61	1.14	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	15.45	1.51
C <sub>13</sub> HN <sub>4</sub>	15.59	1.14	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> O	15.65	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> NO	15.82	1.37
C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> O	15.63	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	15.43	1.51	C <sub>14</sub> HNO <sub>2</sub>	15.60	1.54

C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	16.20	1.54	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	15.99	1.40	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	16.37	1.65
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	15.98	1.39	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	16.37	1.26	C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> N	16.96	1.35
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	16.35	1.25	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> O	16.57	1.49	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> NO	16.74	1.51
C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> O	16.55	1.48	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	16.35	1.65	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	17.12	1.38
C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	16.34	1.65	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> N	16.94	1.35	C <sub>16</sub> H <sub>25</sub>	17.69	1.47
C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> N	16.93	1.34	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> NO	16.73	1.51	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> O	17.47	1.63
C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> NO	16.71	1.51	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	17.10	1.37	C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> N	17.85	1.50
C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	17.08	1.37	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub>	17.67	1.47	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub>	18.58	1.63
C <sub>16</sub> H <sub>23</sub>	17.66	1.47	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> O	17.46	1.63	C <sub>18</sub> H	19.47	1.79
C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> O	17.44	1.63	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> N	17.83	1.50	218		
C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> N	17.82	1.49	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub>	18.56	1.62	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.90	1.35
C <sub>17</sub> H <sub>11</sub>	18.55	1.62	C <sub>18</sub>	19.45	1.79	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.31	1.19
216			217			C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.68	1.03
C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.80	1.34	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.92	1.34	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>4</sub>	11.66	1.42
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.28	1.18	C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.29	1.18	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.04	1.27
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.65	1.02	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.67	1.03	C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.82	1.44
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	11.63	1.42	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>	11.65	1.42	C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.41	1.11
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.01	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.02	1.26	C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.20	1.28
C <sub>10</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.79	1.44	C <sub>10</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.81	1.44	C <sub>10</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub> O	12.79	0.96
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.38	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.40	1.11	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.57	1.13
C <sub>10</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.16	1.28	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.18	1.28	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	12.40	1.51
C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub> O	12.75	0.95	C <sub>10</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub> O	12.77	0.95	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>3</sub>	12.77	1.35
C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.54	1.13	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.55	1.13	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	12.55	1.52
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	12.36	1.50	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub>	12.38	1.50	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.14	1.20
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>3</sub>	12.74	1.35	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>3</sub>	12.75	1.35	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.93	1.27
C <sub>11</sub> HNO <sub>4</sub>	12.52	1.52	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	12.54	1.52	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.30	1.22
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.11	1.19	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.13	1.20	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	13.68	1.07
C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.89	1.37	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.91	1.37	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	13.50	1.44
C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub> O	13.49	1.04	C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O	13.50	1.05	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	13.28	1.61
C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.27	1.21	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.29	1.22	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	13.66	1.46
C <sub>11</sub> H <sub>28</sub> N <sub>4</sub>	13.86	0.89	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	13.66	1.07	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.03	1.31
C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	13.64	1.06	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> O <sub>3</sub>	13.48	1.44	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	14.41	1.17
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub>	13.47	1.44	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	13.27	1.61	C <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.19	1.34
C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	13.25	1.61	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>	13.86	1.29	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	14.78	1.02
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> NO <sub>2</sub>	13.84	1.29	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	13.64	1.46	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	14.56	1.19
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	13.68	1.46	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.02	1.31	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	14.39	1.56
C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub> O	14.22	1.14	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	14.39	1.16	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	14.76	1.41
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.00	1.31	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	14.77	1.02	C <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	14.55	1.58
C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	14.37	1.16	C <sub>12</sub> HN <sub>4</sub> O	14.55	1.19	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	15.14	1.27
C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	14.75	1.01	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	14.37	1.56	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.92	1.44
C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	14.53	1.18	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	14.75	1.41	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	15.51	1.13
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	14.57	1.39	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	15.12	1.27	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	15.30	1.29
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	14.36	1.56	C <sub>13</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.90	1.43	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	15.67	1.15
C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	14.73	1.41	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	15.50	1.12	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	15.49	1.52
C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	15.11	1.26	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	15.28	1.29	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.28	1.69
C <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.89	1.43	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	15.65	1.15	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> NO	15.87	1.38
C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	15.48	1.12	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	15.48	1.52	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	15.65	1.54
C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	15.26	1.29	C <sub>14</sub> HO <sub>3</sub>	15.26	1.68	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	16.24	1.24
C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	15.64	1.14	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> NO	15.85	1.37	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	16.03	1.40
C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	15.46	1.51	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	15.64	1.54	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	16.40	1.26
C <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	15.25	1.68	C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	16.23	1.23	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> O	16.60	1.49
C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> NO	15.84	1.37	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	16.01	1.40	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	16.38	1.66
C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	15.62	1.54	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	16.38	1.26	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> N	16.97	1.35
C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	16.21	1.23	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> O	16.58	1.49	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> NO	16.76	1.52

C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	17.13	1.38	C <sub>18</sub> H <sub>3</sub>	19.50	1.80	C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.98	1.35
C <sub>16</sub> H <sub>26</sub>	17.71	1.47	220			C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.36	1.19
C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> O	17.49	1.64	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.96	1.35	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>	11.71	1.43
C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> N	17.86	1.50	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.34	1.19	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.87	1.45
C <sub>17</sub> H <sub>14</sub>	18.59	1.63	C <sub>9</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.71	1.03	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.24	1.29
C <sub>17</sub> N	18.75	1.66	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>4</sub>	11.70	1.43	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.62	1.14
C <sub>18</sub> H <sub>2</sub>	19.48	1.79	C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.07	1.27	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	12.60	1.53
219			C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.85	1.44	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.97	1.38
C <sub>9</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	10.95	1.35	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.23	1.29	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.35	1.23
C <sub>9</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	11.32	1.19	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.60	1.13	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	13.72	1.07
C <sub>9</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	11.70	1.03	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub>	12.43	1.51	C <sub>11</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.51	1.25
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	11.68	1.42	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	12.58	1.53	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	13.33	1.62
C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.05	1.27	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.96	1.38	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	13.71	1.47
C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.84	1.44	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.33	1.22	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.08	1.32
C <sub>10</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	12.43	1.11	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	13.71	1.07	C <sub>12</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.86	1.49
C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.21	1.29	C <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.49	1.24	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	14.45	1.17
C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.59	1.13	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	13.32	1.62	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.24	1.34
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> O <sub>4</sub>	12.41	1.51	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	13.69	1.47	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	14.83	1.03
C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>3</sub>	12.79	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.06	1.32	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	14.61	1.20
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	12.57	1.53	C <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.85	1.49	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	14.44	1.57
C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.94	1.37	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	14.44	1.17	C <sub>13</sub> HO <sub>4</sub>	14.22	1.74
C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.32	1.22	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.22	1.34	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	14.81	1.42
C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	13.69	1.07	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	14.81	1.02	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	14.59	1.59
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	13.30	1.62	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	14.60	1.19	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	15.19	1.28
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	13.67	1.47	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	14.42	1.57	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.97	1.44
C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.05	1.32	C <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	14.20	1.73	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	15.56	1.13
C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	14.42	1.17	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	14.80	1.42	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	15.34	1.30
C <sub>12</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.21	1.34	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	14.58	1.59	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	15.72	1.16
C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	14.80	1.02	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	15.17	1.27	C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	15.54	1.53
C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	14.58	1.19	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.95	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> 3NO	15.92	1.58
C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	14.41	1.56	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	15.54	1.13	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	15.70	1.55
C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	14.78	1.42	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	15.33	1.30	C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	16.29	1.24
C <sub>13</sub> HNO <sub>3</sub>	14.56	1.59	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	15.70	1.15	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	16.07	1.41
C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	15.15	1.29	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	15.53	1.52	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	16.45	1.27
C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.94	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	15.31	1.69	C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> O	16.65	1.50
C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	15.53	1.13	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> NO	15.90	1.38	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	16.43	1.66
C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	15.31	1.29	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	15.68	1.55	C <sub>15</sub> H <sub>27</sub> N	17.02	1.36
C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	15.69	1.15	C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	16.28	1.24	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> NO	16.81	1.52
C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	15.51	1.52	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	16.06	1.41	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	17.18	1.39
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	15.29	1.69	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	16.43	1.27	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub>	17.75	1.48
C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> NO	15.89	1.39	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> O	16.63	1.50	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> O	17.53	1.63
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	15.67	1.55	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	16.42	1.66	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> N	17.91	1.51
C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	16.26	1.24	C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> N	17.01	1.66	C <sub>16</sub> HN <sub>2</sub>	18.07	1.54
C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	16.04	1.40	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> NO	16.79	1.52	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub>	18.64	1.64
C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	16.42	1.26	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	17.16	1.38	C <sub>17</sub> HO	18.43	1.80
C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> O	16.62	1.49	C <sub>16</sub> H <sub>28</sub>	17.74	1.48	C <sub>17</sub> H <sub>3</sub> N	18.80	1.67
C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	16.40	1.66	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> O	17.52	1.64	C <sub>18</sub> H <sub>5</sub>	19.53	1.80
C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> N	16.99	1.36	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> N	17.90	1.51	222		
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> NO	16.77	1.52	C <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	18.05	1.53	C <sub>9</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.00	1.35
C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	17.15	1.38	C <sub>17</sub> H <sub>16</sub>	18.63	1.64	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.89	1.45
C <sub>16</sub> H <sub>27</sub>	17.72	1.48	C <sub>17</sub> O	18.41	1.80	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.26	1.29
C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N	17.88	1.50	C <sub>17</sub> H <sub>2</sub> N	18.78	1.66	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.63	1.14
C <sub>17</sub> H <sub>15</sub>	18.61	1.63	C <sub>18</sub> H <sub>4</sub>	19.51	1.80	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	12.62	1.53
C <sub>17</sub> HN	18.77	1.66	221			C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	12.99	1.38

$C_{11}H_{16}N_3O_2$	13.37	1.23	$C_{12}H_{15}O_4$	13.36	1.62	$C_{12}H_4N_2O_3$	13.91	1.50
$C_{11}N_3O_3$	13.15	1.40	$C_{12}H_{17}NO_3$	13.74	1.47	$C_{12}H_{22}N_3O$	14.50	1.18
$C_{11}H_{18}N_4O$	13.74	1.08	$C_{12}HNO_4$	13.52	1.65	$C_{12}H_6N_3O_2$	14.29	1.35
$C_{11}H_2N_4O_2$	13.52	1.25	$C_{12}H_{19}N_2O_2$	14.11	1.33	$C_{12}H_{24}N_4$	14.88	1.03
$C_{12}H_{14}O_4$	13.25	1.62	$C_{12}H_3N_2O_3$	13.90	1.50	$C_{13}H_8N_4O$	14.66	1.20
$C_{12}H_{16}NO_3$	13.72	1.47	$C_{12}H_{21}N_3O$	14.49	1.18	$C_{13}H_{20}O_3$	14.49	1.57
$C_{12}NO_4$	13.51	1.64	$C_{12}H_5N_3O_2$	14.27	1.35	$C_{13}H_4O_4$	14.27	1.74
$C_{12}H_{18}N_2O_2$	14.10	1.32	$C_{12}H_{23}N_4$	14.86	1.03	$C_{13}H_{22}NO_2$	14.86	1.43
$C_{12}H_2N_2O_3$	13.88	1.49	$C_{12}H_7N_4O$	14.64	1.20	$C_{13}H_6NO_3$	14.64	1.60
$C_{12}H_{20}N_3O$	14.47	1.18	$C_{13}H_{19}O_3$	14.47	1.57	$C_{13}H_{24}N_2O$	15.23	1.28
$C_{12}H_4N_3O_2$	14.25	1.34	$C_{13}H_3O_4$	14.25	1.64	$C_{13}H_8N_2O_2$	15.02	1.45
$C_{12}H_{22}N_4$	14.85	1.03	$C_{13}H_{21}NO_2$	14.84	1.43	$C_{13}H_{26}N_3$	15.61	1.14
$C_{12}H_6N_4O$	14.63	1.20	$C_{13}H_5NO_3$	14.63	1.59	$C_{13}H_{10}N_3O$	15.39	1.31
$C_{13}H_{18}O_3$	14.45	1.57	$C_{13}H_{23}N_2O$	15.22	1.28	$C_{13}H_{12}N_4$	15.77	1.16
$C_{13}H_2O_4$	14.24	1.74	$C_{13}H_7N_2O_2$	15.00	1.45	$C_{14}H_{24}O_2$	15.59	1.53
$C_{13}H_{20}NO_2$	14.83	1.42	$C_{13}H_{25}N_3$	15.59	1.14	$C_{14}H_8O_3$	15.37	1.70
$C_{13}H_4NO_3$	14.61	1.59	$C_{14}H_{23}O_2$	15.57	1.53	$C_{14}H_{26}NO$	15.97	1.39
$C_{13}H_{22}N_2O$	15.20	1.28	$C_{14}H_7O_3$	15.36	1.70	$C_{14}H_{10}NO_2$	15.75	1.56
$C_{13}H_6N_2O_2$	14.98	1.45	$C_{14}H_{25}NO$	15.95	1.39	$C_{14}H_{28}N_2$	16.34	1.25
$C_{13}H_{24}N_3$	15.58	1.13	$C_{14}H_9NO_2$	15.73	1.56	$C_{14}H_{12}N_2O$	16.12	1.42
$C_{13}H_8N_3O$	15.36	1.30	$C_{14}H_{27}N_2$	16.32	1.25	$C_{14}H_{14}N_3$	16.50	1.28
$C_{13}H_{10}N_4$	15.73	1.16	$C_{14}H_{11}N_2O$	16.11	1.41	$C_{14}N_4$	16.65	1.30
$C_{14}H_{22}O_2$	15.56	1.53	$C_{14}H_{13}N_3$	16.48	1.27	$C_{15}H_{28}O$	16.70	1.51
$C_{14}H_6O_3$	15.34	1.70	$C_{15}H_{27}O$	16.68	1.50	$C_{15}H_{12}O_2$	16.48	1.67
$C_{14}H_{24}NO$	15.93	1.39	$C_{15}H_{11}O_2$	16.46	1.67	$C_{15}H_{30}N$	17.07	1.37
$C_{14}H_8NO_2$	15.72	1.55	$C_{15}H_{29}N$	17.05	1.37	$C_{15}H_{14}NO$	16.85	1.53
$C_{14}H_{26}N_2$	16.31	1.25	$C_{15}H_{13}NO$	16.84	1.53	$C_{15}H_{16}N_2$	17.23	1.39
$C_{14}H_{10}N_2O$	16.09	1.41	$C_{15}H_{15}N_2$	17.21	1.39	$C_{15}N_2O$	17.01	1.56
$C_{14}H_{12}N_3$	16.46	1.27	$C_{15}HN_3$	17.37	1.42	$C_{15}H_2N_3$	17.39	1.42
$C_{15}H_{26}O$	16.66	1.50	$C_{16}H_{31}$	17.79	1.49	$C_{16}H_{32}$	17.80	1.49
$C_{15}H_{10}O_2$	16.45	1.67	$C_{16}H_{15}O$	17.57	1.65	$C_{16}H_{16}O$	17.58	1.65
$C_{15}H_{28}N$	17.04	1.36	$C_{16}H_{17}N$	17.94	1.52	$C_{16}O_2$	17.37	1.82
$C_{15}H_{12}NO$	16.82	1.53	$C_{16}HNO$	17.73	1.68	$C_{16}H_{18}N$	17.96	1.52
$C_{15}H_{14}N_2$	17.20	1.39	$C_{16}H_3N_2$	18.10	1.54	$C_{16}H_2NO$	17.74	1.68
$C_{15}N_3$	17.35	1.42	$C_{17}H_{19}$	18.67	1.64	$C_{16}H_4N_2$	18.12	1.55
$C_{16}H_{30}$	17.77	1.49	$C_{17}H_3O$	18.46	1.80	$C_{17}H_{20}$	18.69	1.65
$C_{16}H_{14}O$	17.55	1.65	$C_{17}H_5N$	18.83	1.67	$C_{17}H_4O$	18.47	1.81
$C_{16}H_{16}N$	17.93	1.51	$C_{18}H_7$	19.56	1.81	$C_{17}H_6N$	18.85	1.68
$C_{16}NO$	17.71	1.67	224			$C_{18}H_8$	19.58	1.81
$C_{16}H_2N_2$	18.08	1.54	$C_{10}H_{12}N_2O_4$	11.92	1.45	225		
$C_{17}H_{18}$	18.66	1.64	$C_{10}H_{14}N_3O_3$	12.29	1.30	$C_{10}H_{13}N_2O_4$	11.93	1.45
$C_{17}H_2O$	18.44	1.80	$C_{10}H_{16}N_4O_2$	12.67	1.14	$C_{10}H_{15}N_3O_3$	12.31	1.3
$C_{17}H_4N$	18.82	1.67	$C_{11}H_{14}NO_4$	12.65	1.54	$C_{10}H_{17}N_4O_2$	12.68	1.14
$C_{18}H_6$	19.55	1.81	$C_{11}H_{16}N_2O_3$	13.02	1.38	$C_{11}H_{15}NO_4$	12.66	1.54
223			$C_{11}N_2O_4$	12.81	1.56	$C_{11}H_{17}N_2O_3$	13.04	1.39
$C_{10}H_{11}N_2O_4$	11.90	1.45	$C_{11}H_{18}N_3O_2$	13.40	1.23	$C_{11}HN_2O_4$	12.82	1.56
$C_{10}H_{13}N_3O_3$	12.28	1.29	$C_{11}H_{18}N_3O_2$	13.40	1.23	$C_{11}H_{19}N_3O_2$	13.41	1.23
$C_{10}H_{15}N_4O_2$	12.65	1.14	$C_{11}H_2N_3O_3$	13.18	1.40	$C_{11}H_3N_3O_3$	13.2	1.41
$C_{11}H_{13}NO_4$	12.63	1.53	$C_{11}H_{20}N_4O$	13.77	1.08	$C_{11}H_{21}N_4O$	13.79	1.08
$C_{11}H_{15}N_2O_3$	13.01	1.38	$C_{11}H_4N_4O_2$	13.55	1.25	$C_{11}H_5N_4O_2$	13.57	1.25
$C_{11}H_{17}N_3O_2$	13.38	1.23	$C_{12}H_{16}O_4$	13.38	1.63	$C_{12}H_{17}O_4$	13.4	1.63
$C_{11}HN_3O_3$	13.16	1.40	$C_{12}H_{18}NO_3$	13.75	1.48	$C_{12}H_{19}NO_3$	13.77	1.48
$C_{11}H_{19}N_4O$	13.76	1.08	$C_{12}H_2NO_4$	13.54	1.65	$C_{12}H_3NO_4$	13.55	1.65
$C_{11}H_3N_4O_2$	13.54	1.25	$C_{12}H_{20}N_2O_2$	14.13	1.33	$C_{12}H_{21}N_2O_2$	14.14	1.33

C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.93	1.5	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.94	1.5	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	13.59	1.65
C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O	14.52	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O	14.53	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.18	1.33
C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.3	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.32	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.96	1.5
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub>	14.89	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub>	14.91	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O	14.55	1.19
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	14.68	1.2	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	14.69	1.21	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.33	1.36
C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub>	14.5	1.58	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	14.52	1.58	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub>	14.93	1.04
C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	14.28	1.75	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	14.3	1.75	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	14.71	1.21
C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>2</sub>	14.88	1.43	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>2</sub>	14.89	1.43	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> O <sub>3</sub>	14.53	1.58
C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	14.66	1.6	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	14.67	1.6	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	14.32	1.75
C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O	15.25	1.29	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O	15.27	1.29	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>2</sub>	14.91	1.44
C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.03	1.45	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.05	1.46	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	14.69	1.6
C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub>	15.62	1.14	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub>	15.64	1.14	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub> O	15.28	1.29
C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	15.41	1.31	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	15.42	1.31	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.06	1.46
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	15.78	1.17	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	15.8	1.17	C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub>	15.66	1.15
C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> O <sub>2</sub>	15.61	1.54	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	15.62	1.54	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	15.44	1.31
C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	15.39	1.7	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	15.41	1.71	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	15.81	1.17
C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> NO	15.98	1.39	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> NO	16	1.4	C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> O <sub>2</sub>	15.64	1.54
C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	15.76	1.56	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	15.87	1.56	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	15.42	1.71
C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub>	16.36	1.25	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub>	16.37	1.26	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> NO	16.01	1.4
C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	16.14	1.42	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	16.15	1.42	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	15.8	1.57
C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	16.51	1.28	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	16.53	1.28	C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> N <sub>2</sub>	16.39	1.26
C <sub>14</sub> HN <sub>4</sub>	16.67	1.3	C <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	16.31	1.45	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	16.17	1.42
C <sub>15</sub> H <sub>29</sub> O	16.71	1.51	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	16.69	1.31	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	16.54	1.28
C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	16.5	1.67	C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> O	16.73	1.51	C <sub>14</sub> HN <sub>3</sub> O	16.33	1.45
C <sub>15</sub> H <sub>31</sub> N	17.09	1.37	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	16.51	1.68	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	16.7	1.31
C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> NO	16.87	1.54	C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> N	17.1	1.37	C <sub>15</sub> H <sub>31</sub> O	16.74	1.51
C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	17.24	1.4	C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> NO	16.89	1.54	C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	16.53	1.68
C <sub>15</sub> HN <sub>2</sub> O	17.03	1.56	C <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	16.67	1.7	C <sub>15</sub> H <sub>33</sub> N	17.12	1.38
C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	17.4	1.42	C <sub>15</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub>	17.26	1.4	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> NO	16.9	1.54
C <sub>16</sub> H <sub>33</sub>	17.82	1.49	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	17.04	1.56	C <sub>15</sub> HNO <sub>2</sub>	16.68	1.7
C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> O	17.6	1.66	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	17.42	1.43	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	17.28	1.4
C <sub>16</sub> HO <sub>2</sub>	17.38	1.82	C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	17.83	1.5	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	17.06	1.57
C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N	17.98	1.52	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> O	17.62	1.66	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> O	17.63	1.66
C <sub>16</sub> H <sub>3</sub> NO	17.76	1.68	C <sub>18</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.4	1.82	C <sub>16</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	17.42	1.82
C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	18.13	1.55	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N	17.99	1.52	C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> N	18.01	1.53
C <sub>17</sub> H <sub>21</sub>	18.71	1.65	C <sub>16</sub> H <sub>4</sub> NO	17.77	1.69	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> NO	17.79	1.69
C <sub>17</sub> H <sub>5</sub> O	18.49	1.81	C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	18.15	1.55	C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	18.16	1.55
C <sub>17</sub> H <sub>7</sub> N	18.86	1.68	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub>	18.72	1.65	C <sub>17</sub> H <sub>23</sub>	18.74	1.66
C <sub>18</sub> H <sub>9</sub>	19.59	1.81	C <sub>17</sub> H <sub>6</sub> O	18.51	1.81	C <sub>17</sub> H <sub>7</sub> O	18.52	1.82
226			C <sub>17</sub> H <sub>8</sub> N	18.88	1.68	C <sub>17</sub> H <sub>9</sub> N	18.9	1.69
C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.95	1.46	C <sub>18</sub> H <sub>10</sub>	19.61	1.82	C <sub>18</sub> H <sub>11</sub>	19.63	1.82
C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.2	1.3	227			228		
C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.7	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.97	1.46	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	11.98	1.46
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	12.68	1.54	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.34	1.3	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.36	1.3
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.05	1.39	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.71	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.73	1.15
C <sub>11</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.84	1.56	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	12.7	1.54	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	12.71	1.54
C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.43	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.07	1.39	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.09	1.39
C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.21	1.41	C <sub>11</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.85	1.56	C <sub>11</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.87	1.56
C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O	13.8	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.45	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.46	1.24
C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.59	1.26	C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.23	1.41	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.24	1.41
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	13.41	1.63	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub> O	13.82	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub> O	13.84	1.09
C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>3</sub>	13.79	1.48	C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.6	1.26	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.62	1.26
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	13.57	1.65	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub>	13.43	1.63	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	13.44	1.64
C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.16	1.33	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	13.8	1.48	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>3</sub>	13.82	1.49

C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	13.6	1.66	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub> O	13.85	1.09	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.49	1.24
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.19	1.34	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.63	1.26	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.28	1.24
C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.98	1.51	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub>	13.46	1.64	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub> O	13.87	1.09
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub> O	14.57	1.19	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>3</sub>	13.83	1.49	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.65	1.27
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.35	1.36	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	13.62	1.66	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	13.48	1.64
C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>4</sub>	14.94	1.04	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.21	1.34	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>3</sub>	13.85	1.49
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	14.72	1.21	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.99	1.51	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	13.63	1.66
C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub>	14.55	1.58	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O	14.58	1.19	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.22	1.34
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	14.33	1.75	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.37	1.36	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.01	1.51
C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> NO <sub>2</sub>	14.92	1.44	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub>	14.96	1.05	C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub> O	14.6	1.19
C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	14.71	1.61	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	14.74	1.21	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.38	1.36
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub> O	15.3	1.29	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> O <sub>3</sub>	14.57	1.59	C <sub>12</sub> H <sub>30</sub> N <sub>4</sub>	14.97	1.05
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.08	1.46	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	14.35	1.76	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	14.76	1.22
C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> N <sub>3</sub>	15.67	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>	14.94	1.44	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	14.58	1.59
C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	15.46	1.32	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	14.72	1.61	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	14.36	1.76
C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	15.83	1.17	C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O	15.31	1.3	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> NO <sub>2</sub>	14.96	1.44
C <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	15.61	1.34	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.1	1.46	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	14.74	1.61
C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	15.65	1.54	C <sub>13</sub> H <sub>31</sub> N <sub>3</sub>	15.69	1.15	C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O	15.33	1.3
C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	15.44	1.71	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	15.47	1.32	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.11	1.47
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> NO	16.03	1.4	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	15.85	1.18	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	15.49	1.32
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	15.81	1.57	C <sub>13</sub> HN <sub>4</sub> O	15.63	1.34	C <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.27	1.49
C <sub>14</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub>	16.4	1.26	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> O <sub>2</sub>	15.67	1.55	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	15.86	1.18
C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	16.19	1.43	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	15.45	1.71	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	15.64	1.35
C <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.97	1.59	C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> NO	16.05	1.41	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	15.69	1.55
C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	16.56	1.29	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	15.83	1.57	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	15.47	1.72
C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	16.34	1.45	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	16.2	4.43	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	15.84	1.57
C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	16.72	1.31	C <sub>14</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.99	1.6	C <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	15.63	1.74
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> O	16.76	1.52	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	16.58	1.29	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	16.22	1.43
C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	16.54	1.68	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	16.36	1.45	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16	1.6
C <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	16.33	1.85	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	16.73	1.32	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub>	16.59	1.29
C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> NO	16.92	1.54	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	16.56	1.68	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O	16.38	1.46
C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	16.7	1.71	C <sub>15</sub> HO <sub>3</sub>	16.34	1.85	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub>	16.75	1.32
C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	17.29	1.41	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> NO	16.93	1.55	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>	16.58	1.69
C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	17.07	1.57	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	16.72	1.71	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> NO	16.36	1.85
C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	17.45	1.43	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	17.31	1.41	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	16.95	1.55
C <sub>16</sub> H <sub>20</sub> O	17.65	1.66	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	17.09	1.57	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>2</sub>	16.73	1.71
C <sub>16</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	17.43	1.83	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	17.47	1.44	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>	17.32	1.41
C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> N	18.02	1.53	C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> O	17.66	1.67	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O	17.11	1.57
C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> NO	17.81	1.69	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	17.45	1.83	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub>	17.48	1.44
C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	18.18	1.56	C <sub>16</sub> H <sub>23</sub> N	18.04	1.53	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O	17.68	1.67
C <sub>17</sub> H <sub>24</sub>	18.75	1.66	C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> NO	17.82	1.69	C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	17.46	1.83
C <sub>17</sub> H <sub>8</sub> O	18.54	1.82	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	18.2	1.56	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> N	18.06	1.54
C <sub>17</sub> H <sub>10</sub> N	18.91	1.69	C <sub>17</sub> H <sub>25</sub>	18.77	1.66	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> NO	17.84	1.7
C <sub>18</sub> H <sub>12</sub>	19.64	1.82	C <sub>17</sub> H <sub>9</sub> O	18.55	1.82	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	18.21	1.56
C <sub>19</sub>	20.53	2	C <sub>17</sub> H <sub>11</sub> N	18.93	1.69	C <sub>17</sub> H <sub>26</sub>	18.79	1.67
229			C <sub>18</sub> H <sub>13</sub>	19.66	1.83	C <sub>17</sub> H <sub>10</sub> O	18.57	1.83
C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12	1.46	C <sub>19</sub> H	20.55	2	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub> N	18.94	1.69
C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.37	1.31	230			C <sub>18</sub> H <sub>14</sub>	19.67	1.83
C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.75	1.15	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.01	1.46	C <sub>18</sub> N	19.83	1.86
C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>	12.73	1.55	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.39	1.31	C <sub>19</sub> H <sub>2</sub>	20.56	2
C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.1	1.39	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.76	1.15	231		
C <sub>11</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.89	1.57	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>4</sub>	12.74	1.55	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.03	1.47
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.48	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.12	1.4	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.4	1.31
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.26	1.41	C <sub>11</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.9	1.57	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.78	1.16

C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	12.76	1.55	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>4</sub>	12.78	1.55	C <sub>10</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.06	1.47
C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.13	1.4	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.15	1.4	C <sub>10</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.44	1.31
C <sub>11</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.92	1.57	C <sub>11</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.93	1.57	C <sub>10</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.81	1.16
C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.51	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.53	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>	12.79	1.56
C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.29	1.42	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.31	1.42	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	13.17	1.4
C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub> O	13.88	1.1	C <sub>11</sub> H <sub>28</sub> N <sub>4</sub> O	13.9	1.1	C <sub>11</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.95	1.57
C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.67	1.27	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.68	1.27	C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	13.54	1.57
C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> O <sub>4</sub>	13.49	1.64	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O <sub>4</sub>	13.51	1.64	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.32	1.42
C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>3</sub>	13.87	1.49	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> NO <sub>3</sub>	13.88	1.49	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.7	1.27
C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>4</sub>	13.65	1.66	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>4</sub>	13.67	1.66	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> O <sub>4</sub>	13.52	1.65
C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.24	1.34	C <sub>10</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	14.26	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>3</sub>	13.9	1.5
C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.02	1.51	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.04	1.52	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>4</sub>	13.68	1.67
C <sub>12</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O	14.61	1.2	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.41	1.37	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.06	1.52
C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.4	1.37	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O	14.79	1.22	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.43	1.37
C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O	14.77	1.22	C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.57	1.39	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O	14.8	1.22
C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> O <sub>3</sub>	14.6	1.59	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	14.61	1.59	C <sub>12</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.59	1.39
C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> O <sub>4</sub>	14.38	1.76	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> O <sub>4</sub>	14.4	1.76	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	14.41	1.76
C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> NO <sub>2</sub>	14.97	1.45	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>3</sub>	14.77	1.62	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	14.79	1.62
C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>3</sub>	14.75	1.61	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.14	1.47	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.16	1.47
C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.13	1.47	C <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.93	1.64	C <sub>13</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.94	1.64
C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	15.5	1.32	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O	15.52	1.33	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	15.54	1.33
C <sub>13</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.29	1.49	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.3	1.49	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.32	1.5
C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub>	15.88	1.18	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub>	15.89	1.18	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	15.91	1.19
C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O	15.66	1.35	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub> O	15.68	1.35	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	15.69	1.35
C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub>	15.49	1.72	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	15.5	1.72	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	15.52	1.72
C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>	15.86	1.58	C <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	15.28	1.89	C <sub>14</sub> HO <sub>4</sub>	15.3	1.89
C <sub>14</sub> HNO <sub>3</sub>	15.64	1.74	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub>	15.88	1.58	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	15.89	1.58
C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O	16.23	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>3</sub>	15.66	1.74	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	15.68	1.75
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.02	1.6	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O	16.25	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	16.27	1.44
C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub>	16.61	1.3	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.03	1.6	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.05	1.61
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O	16.39	1.46	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub>	16.62	1.3	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	16.64	1.3
C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub>	16.77	1.32	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O	16.41	1.46	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	16.42	1.47
C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> O <sub>2</sub>	16.59	1.69	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub>	16.78	1.32	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	16.8	1.33
C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	16.37	1.85	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	16.61	1.69	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	16.62	1.7
C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> NO	16.97	1.55	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	16.39	1.86	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	16.41	1.86
C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	16.75	1.72	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> NO	16.98	1.55	C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> NO	17	1.56
C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	17.34	1.41	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>2</sub>	16.76	1.72	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	16.78	1.72
C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O	17.12	1.58	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	17.36	1.42	C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	17.37	1.42
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub>	17.5	1.44	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	17.14	1.58	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	17.16	1.58
C <sub>16</sub> H <sub>23</sub> O	17.7	1.67	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub>	17.51	1.44	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	17.53	1.45
C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub>	17.48	1.84	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> O	17.71	1.68	C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> O	17.73	1.68
C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> N	18.07	1.54	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	17.5	1.84	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	17.51	1.84
C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> NO	17.85	1.7	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> N	18.09	1.54	C <sub>16</sub> H <sub>27</sub> N	18.1	1.54
C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	18.23	1.57	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> NO	17.87	1.7	C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> NO	17.89	1.71
C <sub>17</sub> H <sub>27</sub>	18.8	1.67	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub>	18.24	1.57	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	18.26	1.57
C <sub>17</sub> H <sub>11</sub> O	18.59	1.83	C <sub>17</sub> H <sub>28</sub>	18.82	1.67	C <sub>17</sub> H <sub>29</sub>	18.83	1.67
C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> N	18.96	1.7	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub> O	18.6	1.83	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> O	18.62	1.83
C <sub>18</sub> H <sub>15</sub>	19.69	1.83	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> N	18.98	1.7	C <sub>17</sub> H <sub>15</sub> N	18.99	1.7
C <sub>18</sub> HN	19.85	1.86	C <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	19.13	1.73	C <sub>17</sub> HN <sub>2</sub>	19.15	1.73
C <sub>19</sub> H <sub>3</sub>	20.58	2.01	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub>	19.71	1.84	C <sub>18</sub> H <sub>17</sub>	19.72	1.84
232			C <sub>18</sub> O	19.49	1.99	C <sub>18</sub> HO	19.51	2
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	12.05	1.47	C <sub>18</sub> H <sub>2</sub> N	19.86	1.87	C <sub>18</sub> H <sub>3</sub> N	19.88	1.87
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	12.42	1.31	C <sub>19</sub> H <sub>4</sub>	20.6	2.01	C <sub>19</sub> H <sub>5</sub>	20.61	2.01
C <sub>10</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	12.79	1.16	233			234		



$C_{10}H_{22}N_2O_4$	12.08	1.47	$C_{19}H_6$	20.63	2.02	236		
$C_{10}H_{24}N_3O_3$	12.45	1.32	235			$C_{10}H_{24}N_2O_4$	12.11	1.48
$C_{10}H_{26}N_4O_2$	12.83	1.16	$C_{10}H_{23}N_2O_4$	12.09	1.47	$C_{11}H_{12}N_2O_4$	13	1.58
$C_{11}H_{24}NO_4$	12.81	1.56	$C_{10}H_{25}N_3O_3$	12.47	1.32	$C_{11}H_{14}N_3O_3$	13.37	1.43
$C_{11}H_{26}N_2O_3$	13.18	1.4	$C_{11}H_{25}NO_4$	12.82	1.56	$C_{11}H_{16}N_4O_2$	13.75	1.67
$C_{11}H_{10}N_2O_4$	12.97	1.58	$C_{11}H_{11}N_2O_4$	12.98	1.58	$C_{12}H_{14}NO_4$	13.73	1.67
$C_{11}H_{12}N_3O_3$	13.34	1.42	$C_{11}H_{13}N_3O_3$	13.36	1.43	$C_{12}H_{16}N_2O_3$	14.1	1.52
$C_{11}H_{14}N_4O_2$	13.71	1.27	$C_{11}H_{15}N_4O_2$	13.73	1.28	$C_{12}N_2O_4$	13.89	1.69
$C_{12}H_{26}O_4$	13.54	1.65	$C_{12}H_{13}NO_4$	13.71	1.67	$C_{12}H_{18}N_3O_2$	14.48	1.38
$C_{12}H_{12}NO_4$	13.7	1.67	$C_{12}H_{15}N_2O_3$	14.09	1.52	$C_{12}H_2N_3O_3$	14.26	1.55
$C_{12}H_{14}N_2O_3$	14.07	1.52	$C_{12}H_{17}N_3O_2$	14.46	1.37	$C_{12}H_{20}N_4O$	14.85	1.23
$C_{12}H_{16}N_3O_2$	14.45	1.37	$C_{12}HN_3O_3$	14.24	1.54	$C_{12}H_4N_4O_2$	14.64	1.4
$C_{12}N_3O_3$	14.23	1.54	$C_{12}H_{19}N_4O$	14.84	1.23	$C_{13}H_{16}O_4$	14.46	1.4
$C_{12}H_{18}N_4O$	14.82	1.23	$C_{12}H_3N_4O_2$	14.62	1.4	$C_{13}H_{18}NO_3$	14.83	1.63
$C_{12}H_2N_4O_2$	14.6	1.39	$C_{13}H_{15}O_4$	14.44	1.77	$C_{13}H_2NO_4$	14.62	1.79
$C_{13}H_{14}O_4$	14.43	1.77	$C_{13}H_{17}NO_3$	14.82	1.62	$C_{13}H_{20}N_2O_2$	15.21	1.48
$C_{13}H_{16}NO_3$	14.8	1.62	$C_{13}HNO_4$	14.6	1.79	$C_{13}H_4N_2O_3$	14.99	1.65
$C_{13}NO_4$	14.59	1.79	$C_{13}H_{19}N_2O_2$	15.19	1.48	$C_{13}H_{22}N_3O$	15.58	1.34
$C_{13}H_{18}N_2O_2$	15.18	1.48	$C_{13}H_3N_2O_3$	14.98	1.65	$C_{13}H_6N_3O_2$	15.37	1.5
$C_{13}H_2N_2O_3$	14.96	1.64	$C_{13}H_{21}N_3O$	15.57	1.33	$C_{13}H_{24}N_4$	15.96	1.19
$C_{13}H_{20}N_3O$	15.55	1.33	$C_{13}H_5N_3O_2$	15.35	1.5	$C_{13}H_8N_4O$	15.74	1.36
$C_{13}H_4N_3O_2$	15.33	1.5	$C_{13}C_{13}H_{23}N_4$	15.94	1.19	$C_{14}H_{20}O_3$	15.57	1.73
$C_{13}H_{22}N_4$	15.93	1.19	$C_{13}H_7N_4O$	15.72	1.36	$C_{14}H_4O_4$	15.35	1.9
$C_{13}H_6N_4O$	15.71	1.36	$C_{14}H_{19}O_3$	15.55	1.73	$C_{14}H_{22}NO_2$	15.94	1.59
$C_{14}H_{18}O_3$	15.53	1.73	$C_{14}H_3O_4$	15.33	1.9	$C_{14}H_6NO_3$	15.72	1.76
$C_{14}H_2O_4$	15.32	1.89	$C_{14}H_{21}NO_2$	15.92	1.59	$C_{14}H_{24}N_2O$	16.31	1.45
$C_{14}H_{20}NO_2$	15.91	1.58	$C_{14}H_5NO_3$	15.71	1.75	$C_{14}H_8N_2O_2$	16.1	1.61
$C_{14}H_4NO_3$	15.69	1.75	$C_{14}H_{23}N_2O$	16.3	1.45	$C_{14}H_{26}N_3$	16.69	1.31
$C_{14}H_{22}N_2O$	16.28	1.44	$C_{14}H_7N_2O_2$	16.08	1.61	$C_{14}H_{10}N_3O$	16.47	1.47
$C_{14}H_6N_2O_2$	16.07	1.61	$C_{14}H_{25}N_3$	16.67	1.31	$C_{14}H_{12}N_4$	16.85	1.33
$C_{14}H_{24}N_3$	16.66	1.3	$C_{14}H_9N_3O$	16.46	1.47	$C_{15}H_{24}O_2$	16.67	1.7
$C_{14}H_8N_3O$	16.44	1.47	$C_{14}H_{11}N_4$	16.83	1.33	$C_{15}H_8O_3$	16.45	1.87
$C_{14}H_{10}N_4$	16.81	1.33	$C_{15}H_{23}O_2$	16.66	1.7	$C_{15}H_{26}NO$	17.05	1.56
$C_{15}H_{22}O_2$	16.64	1.7	$C_{15}H_7O_3$	16.44	1.86	$C_{15}H_{10}NO_2$	16.83	1.73
$C_{15}H_6O_3$	16.42	1.86	$C_{15}H_{25}NO$	17.03	1.56	$C_{15}H_{28}N_2$	17.42	1.43
$C_{15}H_{24}NO$	17.01	1.56	$C_{15}H_9NO_2$	16.81	1.73	$C_{15}H_{12}N_2O$	17.2	1.59
$C_{15}H_8NO_2$	16.8	1.72	$C_{15}H_{27}N_2$	17.4	1.43	$C_{15}H_{14}N_3$	17.58	1.46
$C_{15}H_{26}N_2$	17.39	1.42	$C_{15}H_{11}N_2O$	17.19	1.59	$C_{15}N_4$	17.73	1.48
$C_{15}H_{10}N_2O$	17.17	1.59	$C_{15}H_{13}N_3$	17.56	1.68	$C_{16}H_{28}O$	17.78	1.69
$C_{15}H_{12}N_3$	17.55	1.45	$C_{16}H_{27}O$	17.76	1.68	$C_{16}H_{12}O_2$	17.56	1.85
$C_{16}H_{26}O$	17.74	1.68	$C_{16}H_{11}O_2$	17.54	1.85	$C_{16}H_{30}N$	18.15	1.55
$C_{16}H_{10}O_2$	17.53	1.84	$C_{16}H_{29}N$	18.14	1.55	$C_{16}H_{14}NO$	17.93	1.71
$C_{16}H_{28}N$	18.12	1.55	$C_{16}H_{13}NO$	17.92	1.71	$C_{16}H_{16}N_2$	18.31	1.58
$C_{16}H_{12}NO$	17.9	1.71	$C_{16}H_{15}N_2$	18.29	1.58	$C_{16}N_2O$	18.09	1.74
$C_{16}H_{14}N_2$	18.28	1.58	$C_{16}HN_3$	18.45	1.61	$C_{16}H_2N_3$	18.47	1.61
$C_{16}N_3$	18.43	1.6	$C_{17}H_{31}$	18.87	1.68	$C_{17}H_{32}$	18.88	1.68
$C_{17}H_{30}$	18.85	1.68	$C_{17}H_{15}O$	18.65	1.84	$C_{17}H_{16}O$	18.67	1.84
$C_{17}H_{14}O$	18.63	1.84	$C_{17}H_{17}N$	19.02	1.71	$C_{17}O_2$	18.45	2
$C_{17}H_{16}N$	19.01	1.71	$C_{17}HNO$	18.81	1.87	$C_{17}H_{18}N$	19.04	1.71
$C_{17}NO$	18.79	1.87	$C_{17}H_3N_2$	19.18	1.74	$C_{17}H_2NO$	18.82	1.87
$C_{17}H_2N_2$	19.17	1.74	$C_{18}H_{19}$	19.75	1.85	$C_{17}H_4N_2$	19.2	1.74
$C_{18}H_{18}$	19.74	1.84	$C_{18}H_3O$	19.54	2	$C_{18}H_{20}$	19.77	1.85
$C_{18}H_2O$	19.52	2	$C_{18}H_5N$	19.91	1.88	$C_{18}H_4O$	19.55	2.01
$C_{18}H_4N$	19.9	1.87	$C_{19}H_7$	20.64	2.02	$C_{18}H_6N$	19.93	1.88

C <sub>19</sub> H <sub>8</sub>	20.66	2.02	C <sub>19</sub> H <sub>9</sub>	20.68	2.03	C <sub>18</sub> H <sub>6</sub> O	19.59	2.01
237			238			C <sub>18</sub> H <sub>8</sub> N	19.96	1.89
C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.01	1.58	C <sub>11</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.03	1.59	C <sub>19</sub> H <sub>10</sub>	20.69	2.03
C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.39	1.43	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.4	13.43	239		
C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.76	1.28	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.78	1.28	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.05	1.59
C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>	13.75	1.68	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>4</sub>	13.76	1.68	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.42	1.44
C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.12	1.53	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.14	1.53	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.79	1.29
C <sub>12</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.9	1.7	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.92	1.7	C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>4</sub>	13.78	1.68
C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.49	1.38	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.51	1.38	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.15	1.53
C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.28	1.55	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.29	1.55	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.93	1.7
C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O	14.87	1.23	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O	14.88	1.24	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.53	1.7
C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.65	1.4	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.67	1.4	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.31	1.55
C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> O <sub>4</sub>	14.48	1.77	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> O <sub>4</sub>	14.49	1.78	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub> O	14.9	1.24
C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	14.85	1.63	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>3</sub>	14.87	1.63	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.68	1.41
C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	14.63	1.8	C <sub>13</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>4</sub>	14.65	1.8	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> O <sub>4</sub>	14.51	1.78
C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.22	1.48	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.24	1.48	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	14.88	1.63
C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.01	1.65	C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.02	1.65	C <sub>13</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>4</sub>	14.67	1.78
C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O	15.6	1.34	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O	15.62	1.34	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.26	1.49
C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.38	1.51	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.4	1.51	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.04	1.66
C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub>	15.97	1.2	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub>	15.99	1.2	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O	15.63	1.34
C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O	15.76	1.36	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O	15.77	1.37	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.41	1.51
C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> O <sub>3</sub>	15.58	1.73	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> O <sub>3</sub>	15.6	1.74	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub>	16.01	1.2
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> O <sub>4</sub>	15.36	1.9	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> O <sub>4</sub>	15.38	1.9	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub> O	15.79	1.37
C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>2</sub>	15.96	1.59	C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>2</sub>	15.97	1.59	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> O <sub>3</sub>	15.61	1.74
C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>3</sub>	15.74	1.76	C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>3</sub>	15.76	1.76	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> O <sub>4</sub>	15.40	1.92
C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O	16.33	1.45	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O	16.35	1.45	C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>2</sub>	15.99	1.60
C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.11	1.62	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.13	1.62	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>3</sub>	15.77	1.76
C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub>	16.7	1.31	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub>	16.72	1.31	C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub> O	16.36	1.46
C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	16.49	1.48	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O	16.5	1.48	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.15	1.62
C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub>	16.86	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub>	16.88	1.34	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub>	16.74	1.32
C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> O <sub>2</sub>	16.69	1.71	C <sub>15</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	16.7	1.71	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O	16.52	1.48
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> O <sub>3</sub>	16.47	1.87	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> O <sub>3</sub>	16.49	1.87	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub>	16.89	1.34
C <sub>15</sub> H <sub>27</sub> NO	17.06	1.57	C <sub>15</sub> H <sub>28</sub> NO	17.08	1.57	C <sub>15</sub> H <sub>27</sub> O <sub>2</sub>	16.72	1.71
C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	16.84	1.73	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>2</sub>	16.86	1.73	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> O <sub>3</sub>	16.50	1.88
C <sub>15</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub>	17.44	1.43	C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub>	17.45	1.43	C <sub>15</sub> H <sub>29</sub> NO	17.09	1.57
C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O	17.22	1.59	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O	17.24	1.6	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>	16.88	1.74
C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub>	17.59	1.46	C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub>	17.61	1.46	C <sub>15</sub> H <sub>31</sub> N <sub>2</sub>	17.47	1.44
C <sub>15</sub> HN <sub>4</sub>	17.75	1.48	C <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	17.39	1.62	C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O	17.25	1.60
C <sub>16</sub> H <sub>29</sub> O	17.79	1.69	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub>	17.77	1.49	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	17.63	1.46
C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> O <sub>2</sub>	17.58	1.85	C <sub>16</sub> H <sub>30</sub> O	17.81	1.69	C <sub>15</sub> HN <sub>3</sub> O	17.41	1.63
C <sub>16</sub> H <sub>31</sub> N	18.17	1.56	C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>2</sub>	17.59	1.85	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub>	17.78	1.49
C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> NO	17.95	1.72	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> N	18.18	1.56	C <sub>16</sub> H <sub>31</sub> O	17.82	1.70
C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	18.32	1.58	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> NO	17.97	1.72	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> O <sub>2</sub>	17.61	1.86
C <sub>16</sub> HN <sub>2</sub> O	18.11	1.75	C <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	17.75	1.88	C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> N	18.20	1.56
C <sub>16</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub>	18.48	1.61	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	18.34	1.59	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> NO	17.98	1.72
C <sub>17</sub> H <sub>33</sub>	18.9	1.69	C <sub>16</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	18.12	1.75	C <sub>16</sub> HNO <sub>2</sub>	17.77	1.88
C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> O	18.68	1.85	C <sub>16</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub>	18.5	1.62	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	18.36	1.59
C <sub>17</sub> HO <sub>2</sub>	18.46	2.01	C <sub>17</sub> H <sub>34</sub>	18.91	1.69	C <sub>16</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	18.14	1.75
C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> N	19.06	1.72	C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> O	18.7	1.85	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>	18.51	1.62
C <sub>17</sub> H <sub>3</sub> NO	18.84	1.87	C <sub>17</sub> H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	18.48	2.01	C <sub>17</sub> H <sub>35</sub>	18.93	1.69
C <sub>17</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub>	19.21	1.75	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N	19.07	1.72	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> O	18.71	1.85
C <sub>18</sub> H <sub>21</sub>	19.79	1.85	C <sub>17</sub> H <sub>4</sub> NO	18.85	1.88	C <sub>17</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	18.50	2.01
C <sub>18</sub> H <sub>5</sub> O	19.57	2.01	C <sub>17</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub>	19.23	1.75	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> N	19.09	1.72
C <sub>18</sub> H <sub>7</sub> N	19.94	1.88	C <sub>18</sub> H <sub>22</sub>	19.8	1.86	C <sub>17</sub> H <sub>5</sub> NO	18.87	1.88

C <sub>17</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub>	19.25	1.75	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> O	18.73	1.86	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> NO	18.01	1.73
C <sub>18</sub> H <sub>23</sub>	19.82	1.86	C <sub>17</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	18.51	2.02	C <sub>16</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	17.80	1.89
C <sub>18</sub> H <sub>9</sub> N	19.98	1.89	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub> N	19.10	1.72	C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	18.39	1.60
C <sub>19</sub> H <sub>11</sub>	20.71	2.03	C <sub>17</sub> H <sub>6</sub> NO	18.89	1.88	C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O	18.17	1.76
240			C <sub>17</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub>	19.29	1.75	C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub>	18.55	1.62
C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.06	1.59	C <sub>18</sub> H <sub>24</sub>	18.83	1.86	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> O	18.75	1.86
C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.44	1.44	C <sub>18</sub> H <sub>8</sub> O	19.62	2.02	C <sub>17</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	18.53	2.02
C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.81	1.29	C <sub>18</sub> H <sub>10</sub> N	19.99	1.89	C <sub>17</sub> H <sub>23</sub> N	19.12	1.73
C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>4</sub>	13.79	1.68	C <sub>19</sub> H <sub>12</sub>	20.72	2.22	C <sub>17</sub> H <sub>7</sub> NO	18.80	1.89
C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.17	1.53	C <sub>20</sub>	21.61	2.22	C <sub>17</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub>	19.28	1.76
C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.95	1.70	241			C <sub>18</sub> H <sub>25</sub>	19.85	1.87
C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.54	1.39	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.08	1.59	C <sub>18</sub> H <sub>9</sub> O	19.63	2.02
C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.32	1.56	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.45	1.44	C <sub>18</sub> H <sub>11</sub> N	20.01	1.90
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N <sub>4</sub> O	14.92	1.24	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.83	1.29	C <sub>19</sub> H <sub>13</sub>	20.74	2.04
C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.70	1.41	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>	13.81	1.68	C <sub>20</sub> H	21.63	2.22
C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> O <sub>4</sub>	14.52	1.78	C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.18	1.54	242		
C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> NO <sub>3</sub>	14.90	1.63	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.97	1.71	C <sub>11</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.09	1.59
C <sub>13</sub> H <sub>6</sub> NO <sub>4</sub>	14.68	1.80	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.56	1.39	C <sub>11</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.43	1.44
C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.27	1.49	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.34	1.56	C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.84	1.29
C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.06	1.66	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> N <sub>4</sub> O	14.93	1.24	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>4</sub>	13.83	1.69
C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub> O	15.65	1.35	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.72	1.41	C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.2	1.53
C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.43	1.51	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> O <sub>4</sub>	14.54	1.78	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.98	1.71
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> N <sub>4</sub>	16.02	1.20	C <sub>13</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>3</sub>	14.91	1.64	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.57	1.39
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O	15.80	1.37	C <sub>13</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>4</sub>	14.70	1.81	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.36	1.56
C <sub>14</sub> H <sub>24</sub> O <sub>3</sub>	15.63	1.74	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.29	1.49	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub> O	14.95	1.24
C <sub>14</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	15.41	1.91	C <sub>13</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.09	1.66	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.73	1.41
C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> NO <sub>2</sub>	16.00	1.60	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O	15.66	1.35	C <sub>13</sub> H <sub>22</sub> O <sub>4</sub>	14.56	1.79
C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> NO <sub>3</sub>	15.79	1.77	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.45	1.52	C <sub>13</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>3</sub>	14.93	1.64
C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> N <sub>2</sub> O	16.36	1.46	C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> N <sub>4</sub>	16.04	1.21	C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>4</sub>	14.71	1.81
C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.16	1.62	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>4</sub> O	15.82	1.37	C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.3	1.49
C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> N <sub>3</sub>	16.75	1.32	C <sub>14</sub> H <sub>25</sub> O <sub>3</sub>	15.65	1.74	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.09	1.66
C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O	16.54	1.48	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> O <sub>4</sub>	15.43	1.91	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub> O	15.68	1.35
C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>	16.91	1.35	C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>	16.02	1.60	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.46	1.52
C <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	16.69	1.51	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>3</sub>	15.80	1.77	C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> N <sub>4</sub>	16.05	1.21
C <sub>15</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	16.74	1.71	C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> N <sub>2</sub> O	16.39	1.46	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O	15.84	1.38
C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> O <sub>3</sub>	16.52	1.88	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.18	1.63	C <sub>14</sub> H <sub>26</sub> O <sub>3</sub>	15.66	1.75
C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> NO	17.11	1.58	C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> N <sub>3</sub>	16.77	1.32	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> O <sub>4</sub>	15.44	1.91
C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>2</sub>	16.89	1.74	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O	16.55	1.49	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> NO <sub>2</sub>	16.04	1.6
C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub>	17.48	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>4</sub>	16.93	1.35	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub>	15.82	1.77
C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O	17.27	1.60	C <sub>14</sub> HN <sub>4</sub> O	16.71	1.51	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O	16.41	1.46
C <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.05	1.77	C <sub>15</sub> H <sub>29</sub> O <sub>2</sub>	16.75	1.72	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.19	1.63
C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub>	17.64	1.47	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> O <sub>3</sub>	16.53	1.88	C <sub>14</sub> H <sub>32</sub> N <sub>3</sub>	16.78	1.32
C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O	17.42	1.63	C <sub>15</sub> H <sub>31</sub> NO	17.13	1.58	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O	16.57	1.49
C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> N <sub>4</sub>	17.80	1.49	C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>	16.91	1.74	C <sub>14</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	16.35	1.65
C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O	17.84	1.70	C <sub>15</sub> H <sub>33</sub> N <sub>2</sub>	17.50	1.44	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	16.94	1.35
C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>	17.62	1.86	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O	17.28	1.60	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O	16.73	1.51
C <sub>16</sub> O <sub>3</sub>	17.41	2.02	C <sub>15</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.07	1.77	C <sub>15</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	16.77	1.72
C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> N	18.22	1.56	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	17.66	1.46	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>	16.55	1.88
C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> NO	18.00	1.73	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O	17.44	1.63	C <sub>15</sub> H <sub>32</sub> NO	17.14	1.58
C <sub>16</sub> H <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	17.78	1.89	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub>	17.81	1.50	C <sub>15</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>2</sub>	16.92	1.74
C <sub>16</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>	18.37	1.59	C <sub>16</sub> H <sub>33</sub> O	17.86	1.70	C <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	16.71	1.91
C <sub>16</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O	18.16	1.75	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> O <sub>2</sub>	17.64	1.86	C <sub>15</sub> H <sub>34</sub> N <sub>2</sub>	17.52	1.44
C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> N <sub>3</sub>	18.53	1.62	C <sub>16</sub> HO <sub>3</sub>	17.42	2.03	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O	17.3	1.61
C <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	18.95	1.70	C <sub>16</sub> H <sub>35</sub> N	18.23	1.57	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.08	1.77

$C_{15}H_{20}N_3$	17.67	1.47	$C_{15}H_{15}O_3$	16.57	1.89	$C_{14}N_2O_3$	16.01	1.8
$C_{15}H_4N_3O$	17.46	1.63	$C_{15}H_{33}NO$	17.16	1.58	$C_{14}H_{18}N_3O$	16.6	1.49
$C_{15}H_6N_4$	17.83	1.5	$C_{15}H_{17}NO_2$	16.94	1.75	$C_{14}H_2N_3O_2$	16.38	1.66
$C_{16}H_{34}O$	17.87	1.7	$C_{15}HNO_3$	16.72	1.91	$C_{14}H_{20}N_4$	16.97	1.36
$C_{16}H_{18}O_2$	17.66	1.87	$C_{15}H_{19}N_2O$	17.32	1.61	$C_{14}H_4N_4O$	16.76	1.52
$C_{16}H_2O_3$	17.44	2.03	$C_{15}H_3N_2O_2$	17.1	1.77	$C_{15}H_{32}O_2$	16.8	1.72
$C_{16}H_{20}NO$	18.03	1.73	$C_{15}H_{21}N_3$	17.69	1.47	$C_{15}H_{16}O_3$	16.58	1.89
$C_{16}H_4NO_2$	17.81	1.89	$C_{15}H_5N_3O$	17.47	1.64	$C_{15}O_4$	16.37	2.05
$C_{16}H_{22}N_2$	18.4	1.6	$C_{15}H_7N_4$	17.85	1.5	$C_{15}H_{18}NO_2$	16.96	1.75
$C_{16}H_6N_2O$	18.19	1.76	$C_{16}H_{19}O_2$	17.67	1.87	$C_{15}H_2NO_3$	16.74	1.91
$C_{16}H_8N_3$	18.56	1.63	$C_{16}H_3O_3$	17.47	1.64	$C_{15}H_{20}N_2O$	17.33	1.61
$C_{17}H_{22}O$	18.76	1.86	$C_{16}H_{21}NO$	18.05	1.73	$C_{15}H_4N_2O_2$	17.11	1.78
$C_{17}H_6O_2$	18.54	2.02	$C_{16}H_5NO_2$	17.83	1.9	$C_{15}H_{22}N_3$	17.71	1.48
$C_{17}H_{24}N$	19.14	1.73	$C_{16}H_{23}N_2$	18.42	1.6	$C_{15}H_6N_3O$	17.49	1.64
$C_{17}H_8NO$	18.92	1.89	$C_{16}H_7N_2O$	18.2	1.76	$C_{15}H_8N_4$	17.86	1.5
$C_{17}H_{10}N_2$	19.29	1.76	$C_{16}H_9N_3$	18.58	1.63	$C_{16}H_{20}O_2$	17.69	1.87
$C_{18}H_{26}$	19.87	1.87	$C_{17}H_{23}O$	18.78	1.86	$C_{16}H_4O_3$	17.47	2.03
$C_{18}H_{10}O$	19.65	2.03	$C_{17}H_7O_2$	18.56	2.02	$C_{16}H_{22}NO$	18.06	1.74
$C_{18}H_{12}N$	20.02	1.9	$C_{17}H_{25}N$	19.15	1.73	$C_{16}H_6N_2$	17.85	1.9
$C_{19}H_{14}$	20.76	2.04	$C_{17}H_9NO$	18.93	1.89	$C_{16}H_{24}N_2$	18.44	1.6
$C_{19}N$	20.91	2.08	$C_{17}H_{11}N_2$	19.31	1.76	$C_{16}H_8N_2O$	18.22	1.77
$C_{20}H_2$	21.64	2.23	$C_{18}H_{27}$	19.88	1.87	$C_{16}H_{10}N_3$	18.59	1.63
243			$C_{18}H_{11}O$	19.67	2.03	$C_{17}H_{24}O$	18.79	1.87
$C_{11}H_{19}N_2O_4$	13.11	1.6	$C_{18}H_{13}N$	20.04	1.9	$C_{17}H_8O_2$	18.58	2.03
$C_{11}H_{21}N_3O_3$	13.48	1.44	$C_{19}H_{15}$	20.77	2.05	$C_{17}H_{26}N$	19.17	1.74
$C_{11}H_{23}N_4O_2$	13.86	1.29	$C_{19}HN$	20.93	2.08	$C_{17}H_{10}NO$	18.95	1.90
$C_{12}H_{21}NO_4$	13.84	1.69	$C_{20}H_3$	21.66	2.23	$C_{17}H_{12}N_2$	19.33	1.77
$C_{12}H_{23}N_2O_3$	14.22	1.54	244			$C_{18}H_{28}$	19.90	1.87
$C_{12}H_7N_2O_3$	14	1.71	$C_{11}H_{20}N_2O_4$	13.13	1.6	$C_{18}H_{12}O$	19.68	2.03
$C_{12}H_{25}N_3O_2$	14.59	1.39	$C_{11}H_{22}N_3O_3$	13.5	1.45	$C_{18}H_{14}N$	20.06	1.91
$C_{12}H_9N_3O_3$	14.37	1.56	$C_{11}H_{24}N_4O_2$	13.87	1.3	$C_{18}N_2$	20.21	1.94
$C_{12}H_{27}N_4O$	14.96	1.25	$C_{12}H_{22}NO_4$	13.86	1.69	$C_{19}H_{16}$	20.79	2.05
$C_{12}H_{11}N_4O_2$	14.75	1.42	$C_{12}H_{24}N_2O_3$	14.23	1.54	$C_{19}O$	20.57	2.21
$C_{13}H_{23}O_4$	14.57	1.79	$C_{12}H_8N_2O_4$	14.01	1.71	$C_{19}H_2N$	20.94	2.08
$C_{13}H_25NO_3$	14.95	1.64	$C_{12}H_{26}N_3O_2$	14.61	1.4	$C_{20}H_4$	21.68	2.23
$C_{13}H_9NO_4$	14.73	1.81	$C_{12}H_{10}N_3O_3$	14.39	1.56	245		
$C_{13}H_{27}N_2O_2$	15.32	1.5	$C_{12}H_{28}N_4O$	14.98	1.25	$C_{11}H_{21}N_2O_4$	13.14	1.60
$C_{13}H_{11}N_2O_3$	15.1	1.66	$C_{12}H_{12}N_4O_2$	14.76	1.42	$C_{11}H_{23}N_3O_3$	13.52	1.45
$C_{13}H_{29}N_3O$	15.7	1.35	$C_{13}H_{24}O_4$	14.59	1.79	$C_{11}H_{25}N_4O_2$	13.89	1.30
$C_{13}H_{13}N_3O_2$	15.48	1.52	$C_{13}H_{26}NO_3$	14.96	1.64	$C_{12}H_{23}NO_4$	13.87	1.69
$C_{13}H_{31}N_4$	16.07	1.21	$C_{13}H_{10}NO_4$	14.75	1.81	$C_{12}H_{25}N_2O_3$	14.25	1.54
$C_{13}H_{15}N_4O$	15.85	1.38	$C_{13}H_{28}N_2O_2$	15.34	1.5	$C_{12}H_9N_2O_4$	14.03	1.71
$C_{14}H_{27}O_3$	15.68	1.75	$C_{13}H_{12}N_2O_3$	15.12	1.67	$C_{12}H_{27}N_3O_2$	14.62	1.4
$C_{14}H_{11}O_4$	15.46	1.92	$C_{13}H_{30}N_3O$	15.71	1.36	$C_{12}H_{11}N_3O_3$	14.40	1.57
$C_{14}H_{29}NO_2$	16.05	1.61	$C_{13}H_{14}N_3O_2$	15.49	1.52	$C_{12}H_{29}N_4O$	15.0	1.25
$C_{14}H_{13}NO_3$	15.84	1.77	$C_{13}H_{32}N_4$	16.09	1.21	$C_{12}H_{13}N_4O_2$	14.78	1.42
$C_{14}H_{31}N_2O$	16.43	1.47	$C_{13}H_{16}N_4O$	15.87	1.38	$C_{13}H_{25}O_4$	14.60	1.79
$C_{14}H_{15}N_2O_2$	16.21	1.63	$C_{13}N_4O_2$	15.65	1.55	$C_{13}H_{27}NO_3$	14.98	1.65
$C_{14}H_{33}N_3$	16.8	1.33	$C_{14}H_{28}O_3$	15.69	1.75	$C_{13}H_{11}NO_4$	14.76	1.81
$C_{14}H_{17}N_3O$	16.58	1.49	$C_{14}H_{12}O_4$	15.48	1.92	$C_{13}H_{29}N_2O_2$	15.35	1.50
$C_{14}HN_3O_2$	16.37	1.66	$C_{14}H_{30}NO_2$	16.07	1.61	$C_{13}H_{13}N_2O_3$	15.14	1.67
$C_{14}H_{19}N_4$	16.96	1.35	$C_{14}H_{14}NO_3$	15.85	1.78	$C_{13}H_{31}N_3O$	15.73	1.36
$C_{14}H_3N_4O$	16.74	1.52	$C_{14}H_{32}N_2O$	16.44	1.47	$C_{13}H_{15}N_3O_2$	15.51	1.53
$C_{15}H_{31}O_2$	16.78	1.72	$C_{14}H_{16}N_2O_2$	16.23	1.63	$C_{13}H_{17}N_4O$	15.88	1.38

C <sub>13</sub> HN <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	15.67	1.55	C <sub>13</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	15.37	1.50	C <sub>12</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.65	1.40
C <sub>14</sub> H <sub>29</sub> O <sub>3</sub>	15.71	1.75	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.15	1.67	C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.44	1.57
C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> O <sub>4</sub>	15.49	1.92	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.53	1.53	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.81	1.42
C <sub>14</sub> H <sub>31</sub> NO <sub>2</sub>	16.08	1.61	C <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	15.31	1.70	C <sub>13</sub> H <sub>27</sub> O <sub>4</sub>	14.64	1.80
C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	15.87	1.78	C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O	15.90	1.39	C <sub>13</sub> H <sub>29</sub> NO <sub>3</sub>	15.01	1.65
C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.24	1.64	C <sub>13</sub> H <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	15.68	1.55	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>4</sub>	14.79	1.82
C <sub>14</sub> HN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	16.02	1.80	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	15.73	1.75	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	15.17	1.67
C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O	16.62	1.50	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>4</sub>	15.51	1.92	C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15.17	1.67
C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	16.40	1.66	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> NO <sub>3</sub>	15.88	1.78	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	15.54	1.53
C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> N <sub>4</sub>	16.99	1.36	C <sub>14</sub> NO <sub>4</sub>	15.67	1.95	C <sub>13</sub> HN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	15.33	1.70
C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>4</sub> O	16.77	1.52	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.26	1.64	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>4</sub> O	15.92	1.39
C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> O <sub>3</sub>	16.60	1.89	C <sub>14</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	16.04	1.80	C <sub>13</sub> H <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	15.70	1.55
C <sub>15</sub> HO <sub>4</sub>	16.38	2.06	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>3</sub> O	16.63	1.50	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub>	15.52	1.93
C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>2</sub>	16.97	1.75	C <sub>14</sub> H <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	16.41	1.66	C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>	15.90	1.78
C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> NO <sub>3</sub>	16.76	1.92	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub>	17.01	1.36	C <sub>14</sub> HNO <sub>4</sub>	15.68	1.95
C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O	17.35	1.62	C <sub>14</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O	16.79	1.53	C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.27	1.64
C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	13.13	1.78	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> O <sub>3</sub>	16.61	1.89	C <sub>14</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	16.06	1.81
C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub>	17.72	1.48	C <sub>15</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	16.40	2.06	C <sub>14</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	16.65	1.50
C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O	17.50	1.64	C <sub>15</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>2</sub>	16.99	1.76	C <sub>14</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	16.43	1.67
C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>4</sub>	17.88	1.51	C <sub>15</sub> H <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>	16.77	1.92	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> N <sub>4</sub>	17.02	1.36
C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> O <sub>2</sub>	17.70	1.87	C <sub>15</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	17.36	1.62	C <sub>14</sub> H <sub>7</sub> N <sub>4</sub> O	16.81	1.53
C <sub>16</sub> H <sub>5</sub> O <sub>3</sub>	17.49	2.04	C <sub>15</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.15	1.78	C <sub>15</sub> H <sub>19</sub> O <sub>3</sub>	16.63	1.90
C <sub>16</sub> H <sub>23</sub> NO	18.08	1.74	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub>	17.74	1.48	C <sub>15</sub> H <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	16.41	2.06
C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> NO <sub>2</sub>	17.86	1.90	C <sub>15</sub> H <sub>8</sub> N <sub>3</sub> O	17.52	1.65	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub>	17.00	1.76
C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	18.45	1.61	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub>	17.89	1.51	C <sub>15</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>	16.79	1.92
C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> N <sub>2</sub> O	18.24	1.77	C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>	17.72	1.88	C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O	17.38	1.62
C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub>	18.61	1.64	C <sub>16</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>	17.50	2.04	C <sub>15</sub> H <sub>7</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	17.16	1.78
C <sub>17</sub> H <sub>25</sub> O	18.81	1.87	C <sub>16</sub> H <sub>24</sub> NO	18.09	1.74	C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub>	17.75	1.49
C <sub>17</sub> H <sub>9</sub> O <sub>2</sub>	18.59	2.03	C <sub>16</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	17.88	1.90	C <sub>15</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O	17.54	1.65
C <sub>17</sub> H <sub>27</sub> N	19.18	1.74	C <sub>16</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub>	18.47	1.61	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> N <sub>4</sub>	17.91	1.51
C <sub>17</sub> H <sub>11</sub> NO	18.97	1.90	C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O	18.25	1.77	C <sub>16</sub> H <sub>23</sub> O <sub>2</sub>	17.74	1.88
C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	19.34	1.77	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub>	18.63	1.64	C <sub>16</sub> H <sub>7</sub> O <sub>3</sub>	17.52	2.04
C <sub>18</sub> H <sub>29</sub>	19.91	1.88	C <sub>17</sub> H <sub>26</sub> O	18.83	1.87	C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> NO	18.11	1.75
C <sub>18</sub> H <sub>13</sub> O	19.70	2.04	C <sub>17</sub> H <sub>10</sub> O <sub>2</sub>	18.61	2.03	C <sub>16</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	17.89	1.91
C <sub>18</sub> H <sub>15</sub> N	20.07	1.91	C <sub>17</sub> H <sub>28</sub> N	19.20	1.74	C <sub>16</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub>	18.48	1.61
C <sub>18</sub> HN <sub>2</sub>	20.23	1.94	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub> NO	18.98	1.90	C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O	18.27	1.77
C <sub>19</sub> H <sub>17</sub>	20.80	2.05	C <sub>17</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>	19.36	1.77	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub>	18.64	1.64
C <sub>19</sub> HO	20.59	2.21	C <sub>17</sub> N <sub>3</sub>	19.51	1.80	C <sub>17</sub> H <sub>27</sub> O	18.84	1.88
C <sub>19</sub> H <sub>3</sub> N	20.96	2.09	C <sub>18</sub> H <sub>30</sub>	19.93	1.88	C <sub>17</sub> H <sub>11</sub> O <sub>2</sub>	18.62	2.04
C <sub>20</sub> H <sub>5</sub>	21.69	2.24	C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> O	19.71	2.04	C <sub>17</sub> H <sub>29</sub> N	19.22	1.75
246			C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> N	20.09	1.91	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> NO	19.00	1.91
C <sub>11</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.16	1.60	C <sub>18</sub> NO	19.87	2.09	C <sub>17</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	19.37	1.78
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.53	1.45	C <sub>18</sub> H <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	20.25	1.94	C <sub>17</sub> HN <sub>3</sub>	19.53	1.81
C <sub>11</sub> H <sub>26</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.91	1.30	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub>	20.82	2.06	C <sub>17</sub> H <sub>31</sub>	19.90	1.88
C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>4</sub>	13.89	1.70	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub>	20.60	2.21	C <sub>18</sub> H <sub>15</sub> O	19.73	2.04
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.26	1.55	C <sub>19</sub> H <sub>4</sub> N	20.98	2.09	C <sub>18</sub> H <sub>17</sub> N	20.10	1.92
C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	14.05	1.72	C <sub>20</sub> H <sub>6</sub>	21.71	2.24	C <sub>18</sub> HNO	19.89	2.07
C <sub>12</sub> H <sub>28</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14.64	1.40	247			C <sub>18</sub> H <sub>3</sub> N <sub>2</sub>	20.26	1.95
C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	14.42	1.57	C <sub>11</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.17	1.60	C <sub>19</sub> H <sub>19</sub>	20.84	2.06
C <sub>12</sub> H <sub>30</sub> N <sub>4</sub> O	15.01	1.25	C <sub>11</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	13.55	1.45	C <sub>19</sub> H <sub>30</sub>	20.62	2.22
C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	14.80	1.42	C <sub>11</sub> H <sub>27</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13.92	1.30	C <sub>19</sub> H <sub>5</sub> N	20.99	2.09
C <sub>13</sub> H <sub>26</sub> O <sub>4</sub>	14.62	1.79	C <sub>12</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>4</sub>	13.91	1.70	C <sub>20</sub> H <sub>7</sub>	21.72	2.24
C <sub>13</sub> H <sub>28</sub> NO <sub>3</sub>	14.99	1.65	C <sub>12</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	14.28	1.55	248		
C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>4</sub>	14.78	1.82	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	14.06	1.72	C <sub>11</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	13.19	1.61

$C_{11}H_{26}N_3O_3$	13.56	1.45	$C_{19}H_2O$	20.85	2.06	$C_{81}H_{19}N$	20.14	1.92
$C_{11}H_{28}N_4O_2$	13.94	1.31	$C_{19}H_4O$	20.63	2.22	$C_{18}H_3NO$	19.92	2.08
$C_{12}H_{26}NO_4$	13.92	1.70	$C_{19}H_6N$	21.01	2.10	$C_{18}H_5N_2$	20.29	1.95
$C_{12}H_{28}N_2O_3$	14.30	1.55	$C_{20}H_8$	21.74	2.25	$C_{19}H_{21}$	20.87	2.07
$C_{12}H_{12}N_2O_4$	14.08	1.72	249			$C_{19}H_5O$	20.65	2.22
$C_{12}H_{14}N_3O_3$	14.55	1.57	$C_{11}H_{25}N_2O_4$	13.21	1.61	$C_{19}H_7N$	21.02	2.10
$C_{12}H_{16}N_4O_2$	14.83	1.43	$C_{11}H_{27}N_3O_3$	13.58	1.46	$C_{20}H_9$	21.76	2.25
$C_{13}H_{28}O_4$	14.65	1.80	$C_{12}H_{27}NO_4$	13.94	1.70	250		
$C_{13}H_{14}NO_4$	14.81	1.82	$C_{12}H_{13}N_2O_4$	14.09	1.72	$C_{11}H_{26}N_2O_4$	13.22	1.61
$C_{13}H_{16}N_2O_3$	15.18	1.68	$C_{12}H_{15}N_3O_3$	14.47	1.58	$C_{12}H_{14}N_2O_4$	14.11	1.73
$C_{13}N_2O_4$	14.97	1.84	$C_{12}H_{17}N_4O_2$	14.84	1.43	$C_{12}H_{16}N_3O_3$	14.48	1.58
$C_{13}H_{18}N_3O_2$	15.56	1.53	$C_{13}H_{15}NO_4$	14.83	1.82	$C_{12}H_{16}NO_4$	14.84	1.83
$C_{13}H_2N_3O_3$	15.34	1.70	$C_{13}H_{17}N_2O_3$	15.20	1.68	$C_{12}H_{18}N_4O_2$	14.86	1.43
$C_{13}H_{20}N_4O$	15.93	1.39	$C_{13}HN_2O_4$	14.98	1.85	$C_{13}H_{18}N_2O_3$	15.22	1.68
$C_{13}H_4N_4O_2$	15.72	1.56	$C_{13}H_{19}N_3O_2$	15.57	1.54	$C_{13}H_{18}O_4$	15.57	1.93
$C_{14}H_{16}O_4$	15.54	1.93	$C_{13}H_3N_3O_3$	15.36	1.70	$C_{13}H_{20}N_3O_2$	15.59	1.54
$C_{14}H_{18}NO_3$	15.92	1.79	$C_{13}H_{21}N_4O$	15.95	1.39	$C_{13}H_{22}N_4O$	15.96	1.40
$C_{14}H_2NO_4$	15.70	1.95	$C_{13}H_5N_4O_2$	15.73	1.56	$C_{13}H_2N_2O_4$	15.00	1.85
$C_{14}H_{20}N_2O_2$	16.29	1.64	$C_{14}H_{17}O_4$	15.56	1.93	$C_{13}H_4N_3O_3$	15.37	1.71
$C_{14}H_4N_2O_3$	16.07	1.81	$C_{14}H_{19}NO_3$	15.93	1.79	$C_{13}H_6N_4O_2$	15.75	1.56
$C_{14}H_{22}N_3O$	16.66	1.50	$C_{14}H_3NO_4$	15.71	1.95	$C_{14}H_{10}N_4O$	16.85	1.54
$C_{14}H_6N_3O_2$	16.45	1.67	$C_{14}H_{21}N_2O_2$	16.31	1.65	$C_{14}H_{20}NO_3$	15.95	1.79
$C_{14}H_{24}N_4$	17.07	1.37	$C_{14}H_5N_2O_2$	16.09	1.81	$C_{14}H_{22}N_2O_2$	16.32	1.65
$C_{14}H_8N_4O$	16.82	1.53	$C_{14}H_{23}N_3O$	16.68	1.51	$C_{14}H_{22}O_3$	16.68	1.90
$C_{15}H_{20}O_3$	16.65	1.90	$C_{14}H_7N_3O_2$	16.46	1.76	$C_{14}H_{24}N_3O$	16.70	1.51
$C_{15}H_4O_4$	16.43	2.06	$C_{14}H_{25}N_4$	17.05	1.37	$C_{14}H_{26}N_4$	17.07	1.37
$C_{15}H_{22}NO_2$	17.02	1.76	$C_{14}H_9N_4O$	16.84	1.53	$C_{14}H_4NO_4$	15.73	1.96
$C_{15}H_6NO_3$	16.80	1.92	$C_{15}H_{21}O_3$	16.66	1.90	$C_{14}H_6N_2O_3$	16.10	1.82
$C_{15}H_{24}N_2O$	17.40	1.62	$C_{15}H_5O_4$	16.45	2.07	$C_{14}H_8N_3O_2$	16.48	1.67
$C_{15}H_8N_2O_2$	17.18	1.79	$C_{15}H_{23}NO_2$	17.04	1.76	$C_{15}H_{10}N_2O_2$	17.21	1.79
$C_{15}H_{26}N_3$	17.77	1.49	$C_{15}H_7NO_3$	16.82	1.93	$C_{15}H_{12}N_3O$	17.58	1.66
$C_{15}H_{10}N_3O$	17.55	1.65	$C_{15}H_{25}N_2O$	17.41	1.63	$C_{15}H_{14}N_4$	17.96	1.52
$C_{15}H_{12}N_4$	17.93	1.52	$C_{15}H_9N_2O_2$	17.19	1.79	$C_{15}H_{24}NO_2$	17.05	1.77
$C_{15}H_{24}O_2$	17.75	1.88	$C_{15}H_{27}N_3$	17.79	1.49	$C_{15}H_{26}N_2O$	17.43	1.63
$C_{16}H_8O_3$	17.53	2.05	$C_{15}H_{11}N_3O$	17.57	1.65	$C_{15}H_{28}N_3$	17.80	1.49
$C_{16}H_{26}NO$	18.13	1.75	$C_{15}H_{13}N_4$	17.94	1.52	$C_{15}H_6O_4$	16.46	2.07
$C_{16}H_{10}NO_2$	17.91	1.91	$C_{16}H_{25}O_2$	17.77	1.89	$C_{15}H_8NO_3$	16.84	1.93
$C_{16}H_{28}N_2$	18.50	1.62	$C_{16}H_9O_3$	17.55	2.05	$C_{16}H_{10}O_3$	17.57	2.05
$C_{16}H_{12}N_2O$	18.28	1.78	$C_{16}H_{27}NO$	18.14	1.75	$C_{16}H_{12}NO_2$	17.94	1.72
$C_{16}H_{14}N_3$	18.66	1.64	$C_{16}H_{11}NO_2$	17.93	1.91	$C_{16}H_{14}N_2O$	18.32	1.78
$C_{16}N_4$	18.82	1.67	$C_{16}H_{29}N_2$	18.52	1.62	$C_{16}H_{16}N_3$	18.69	1.65
$C_{17}H_{28}O$	18.86	1.88	$C_{16}H_{13}N_2O$	18.30	1.78	$C_{16}H_{26}O_2$	17.78	1.89
$C_{17}H_{12}O_2$	18.64	2.04	$C_{16}H_{15}N_3$	18.67	1.65	$C_{16}H_{28}NO$	18.16	1.75
$C_{17}H_{30}N$	19.23	1.75	$C_{16}HN_4$	18.83	1.68	$C_{16}H_2N_4$	18.85	1.68
$C_{17}H_{14}NO$	19.01	1.91	$C_{17}H_{29}O$	18.87	1.88	$C_{16}H_{30}N_2$	18.53	1.62
$C_{17}H_{16}N_2$	19.39	1.78	$C_{17}H_{13}O_2$	18.66	2.04	$C_{16}N_3O$	18.47	1.81
$C_{17}N_2O$	19.17	1.94	$C_{17}H_{31}N$	19.25	1.75	$C_{17}H_{14}O_2$	18.67	2.04
$C_{17}H_2N_3$	19.55	1.81	$C_{17}H_{15}NO$	19.03	1.91	$C_{17}H_{16}NO$	19.05	1.91
$C_{18}H_{32}$	19.96	1.89	$C_{17}H_{17}N_2$	19.41	1.78	$C_{17}H_{18}N_2$	19.42	1.79
$C_{18}H_{16}O$	19.75	2.04	$C_{17}HN_2O$	19.19	1.94	$C_{17}H_2N_2O$	19.20	1.94
$C_{18}O_2$	19.53	2.20	$C_{17}H_3N_3$	19.56	1.81	$C_{17}H_{30}O$	18.89	1.89
$C_{18}H_{18}N$	20.12	1.92	$C_{18}H_{33}$	19.98	1.89	$C_{17}H_{32}N$	19.26	1.76
$C_{18}H_2NO$	19.90	2.08	$C_{18}H_{17}O$	19.76	2.05	$C_{17}H_4N_3$	19.58	1.82
$C_{18}H_4N_2$	20.28	1.95	$C_{18}HO_2$	19.54	2.21	$C_{17}NO_2$	18.83	2.07

---

$C_{18}H_{18}O$	19.78	2.05
$C_{18}H_{20}N$	20.15	1.92
$C_{18}H_{22}O_2$	19.56	2.21
$C_{18}H_{34}$	19.99	1.89
$C_{18}H_4NO$	19.94	2.08
$C_{18}H_6N_2$	20.31	1.96
$C_{19}H_{22}$	20.88	2.07
$C_{19}H_6O$	20.67	2.23
$C_{19}H_8N$	21.04	2.10
$C_{20}H_{10}$	21.77	2.25

# *Chapitre II*

## *Spectrométrie Ultra-Violet*



## **Chapitre II : Spectrométrie d'absorption de l'Ultraviolet -visible**

### **II.1 Introduction**

Les photons constituant le rayonnement UV ont une énergie suffisamment forte pour réaliser des transitions électroniques depuis l'état fondamental vers l'état excité [10]. L'absorption moléculaire dans le spectre Ultraviolet (UV) et visible dépend de la structure électronique de la molécule [11]. L'absorption d'énergie est quantifiée et résulte du passage des électrons d'orbitales de l'état fondamental vers des orbitales d'un état excité d'énergie supérieure. Pour beaucoup de structures électroniques, l'absorption se fait dans la partie difficilement accessible de la région UV. En pratique, la spectrométrie UV se limite normalement aux systèmes conjugués [7].

### **II.2 Le domaine spectral UV-Visible et l'origine des absorptions**

Ce domaine spectral est divisé en trois plages proches UV (220-400 nm) [12], visible (400-700nm)[12], et très proche infrarouge (700-1100 nm). L'ultraviolet lointain pour les longueurs d'onde comprise entre 100 et 190 ou 200 nm [13]. La plus part des spectromètre commerciaux couvrent la gamme allant de 185 à 900 nm.

A l'état fondamental (un atome quelconque, est dans un états fondamentale si son énergie électronique est minimal [13]) les électrons des liaisons occupent les orbitales de plus basses énergies [14]. En prenant pour exemple les composés rencontrés en chimie organique, formés par la réunion d'atomes légers (H, C, N, O), les transitions dites " vibroniques " ont pour origine les électrons engagés dans les liaisons  $\sigma$  et  $\pi$ , ou les doublets non-liants n, d'où le terme de spectres électroniques. Au cours des transitions, des modifications de la polarité des liaisons surviennent, qui ont fait donner aux spectres, dans ce domaine, le nom générique de spectres de transfert de charge[15].

La relation entre l'énergie absorbé au cours de la transition électronique et la fréquence ( $\nu$ ), la longueur d'onde ( $\lambda$ ) et le nombre d'onde  $\nu^*$  [7].

$$\Delta E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = h\nu^*c \quad (\text{II.1})$$

Où  $h$  et le constante de Planck,  $c$  la vitesse de la lumière et  $\Delta E$  est l'énergie absorbé au cours de la transition électronique dans une molécule depuis un état de basse énergie (état

fondamental) vers un état d'énergie plus élevé : état excité (les atomes ne sont pas nécessairement, à tous moment, dans leur état fondamental [16].

### II.3 Le spectre UV-Visible et l'absorption lumineuse

Les spectres UV/Visible permettent d'obtenir le spectre des composés examinés sous la forme d'un tracé de la transmittance ou de l'absorbance en fonction des longueurs d'onde repérées en nanomètres (nm) [6].

$$T = \frac{I}{I_0} \quad (\text{II.2})$$

Où  $T$  est la transmittance,  $I_0$  est l'intensité de l'énergie d'irradiation arrivant sur l'échantillon et  $I$  est l'intensité de la radiation qui a traversé l'échantillon. Une expression plus adéquate de l'intensité d'absorption est celle dérivée de la loi de Lambert-Beer, qui établit la relation entre l'absorbance, l'épaisseur de l'échantillon et la concentration des espèces absorbantes. Cette relation s'écrit :

$$\log_{10} \left( \frac{I}{I_0} \right) = Kcb = A \quad (\text{II.3})$$

Avec

$K$  : La constante caractéristique du soluté

$c$  : La concentration du soluté

$b$  : La longueur du chemin optique à travers l'échantillon

$A$  : L'absorbance (densité optique dans la littérature ancienne)

Les spectres des composés étudiés en phase condensée purs ou en solution. Présentent généralement des bandes d'absorption larges et peu nombreuses [6]. Mais, les spectres obtenus à partir d'échantillons à l'état gazeux et sous faible pression, font apparaître une structure fine. Pour les composés dont la composition atomique est particulièrement simple, les transitions fondamentales apparaissent isolement si le spectromètre possède une très grande résolution.

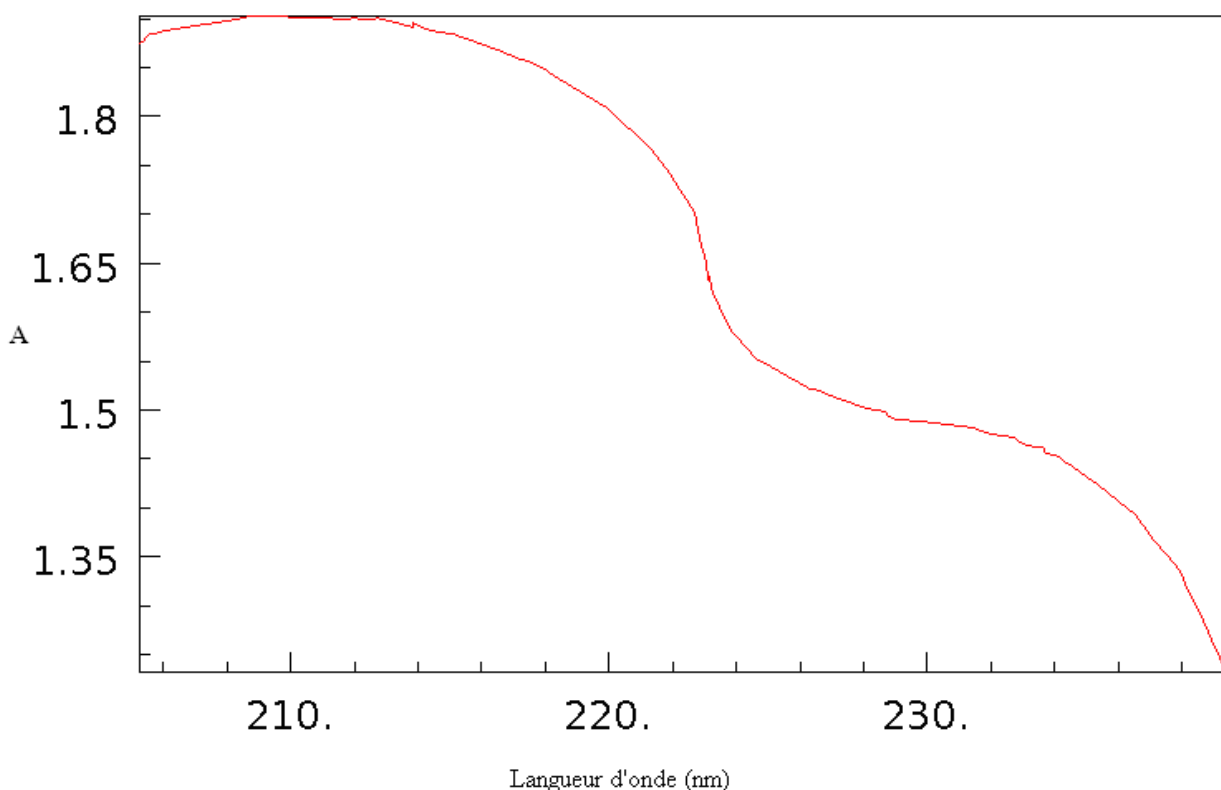


Figure 4 : le spectre UV/visible de l'acide acétique

#### II.4 Transitions électroniques des composés organiques

Elle correspondant pour chacune d'elle au passage d'un électron d'une orbitale liante, à une orbitale antiliante et donne lieu à une absorption d'énergie sous forme d'une radiation lumineuse d'une longueur d'onde déterminée [17] ; il est évident que l'environnement (nature des groupements substituants portés par les atomes impliqués) aura un retentissement plus ou moins important sur les niveaux énergétiques correspondant à cette transition [18].

##### II.4.1 Transition $\sigma \rightarrow \sigma^*$

La grande stabilité des liaisons  $\sigma$  des composés organiques se traduit par un écart important entre les niveaux orbitaux frontières correspondants [2]. Cette transition d'un électron d'une orbitale moléculaire (OM) liante  $\sigma$  dans une OM anti-liante  $\sigma^*$  demande beaucoup d'énergie ; elle est intense et située dans le lointain UV, vers 130 nm ( $\lambda_{\max}$ , éthane = 135 nm,  $\epsilon = 10\,000$ ) [7]. C'est pourquoi les hydrocarbures saturés, tels l'hexane ou le cyclohexane, qui ne présentent que des liaisons de type  $\sigma$ , sont pratiquement transparents dans le proche UV

**II.4.2 Transition  $n \rightarrow \sigma^*$** 

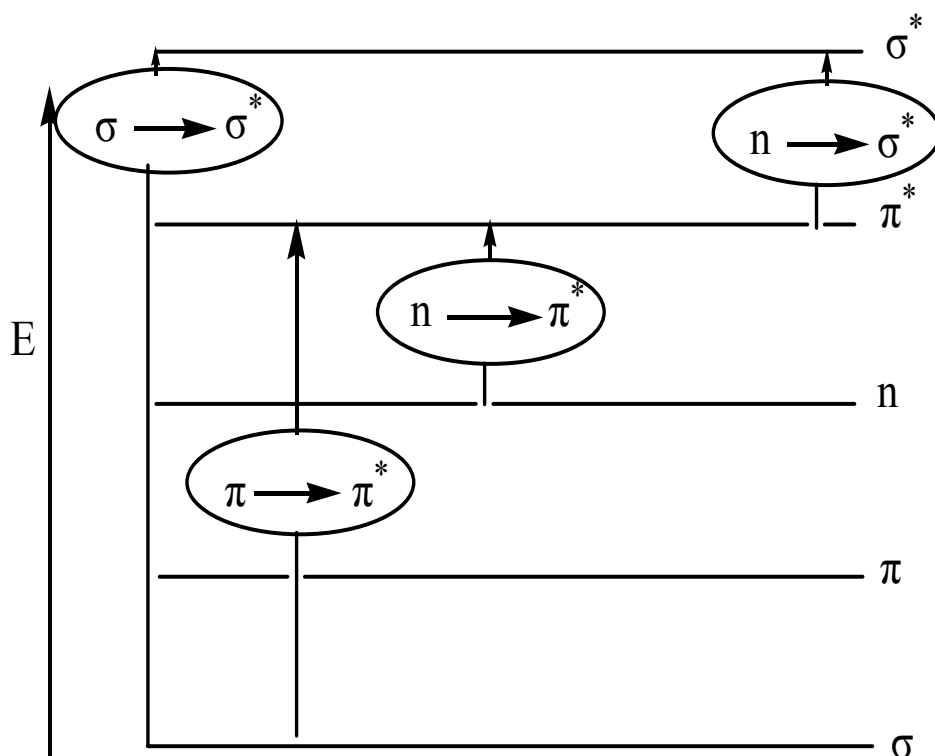
Le transfert d'un électron d'une paire libre (doublet  $n$ ) des atomes O, N, S, X à un niveau  $\sigma^*$  conduit à une transition d'intensité moyenne qui se situe vers 180 nm pour les alcools [7], pour les amines vers 220 nm, pour les éthers vers 190 nm ainsi que pour les dérivés halogénés (méthanol :  $\lambda_{\max} = 183$  nm,  $\varepsilon = 500$ . éther :  $\lambda_{\max} = 190$ ,  $\varepsilon = 2000$ ).

**II.4.3 transition  $n \rightarrow \pi^*$** 

Cette transition résulte du passage d'un électron d'une orbitale moléculaire (OM) non liante  $n$  à une OM antiliante  $\pi^*$ . Ce type de transition est rencontré, dans le cas des molécules comportent un hétéroatome [4], porteur de doublets électroniques libres appartenant à un système insaturé. La plus connue est celle qui correspond à la bande carbonyle, facilement observable, située entre 270 et 280 nm.

**II.4.4 transition  $\pi \rightarrow \pi^*$** 

Dans le cas d'une liaison C=C, l'absorption fait passer un électron  $\pi$  dans une orbitales antiliante  $\pi^*$ . L'activité des chromophores est donc due à une transition  $\pi \rightarrow \pi^*$ . Pour une liaison double non conjuguée, l'énergie correspondante est de l'ordre de 7 eV, ce qui correspond a une absorption à 180 nm [8].



**Figure 5** : comparatif des transitions les plus rencontrées dans les composés organiques simples (transitions électroniques)

## II.5 Groupement chromophores

Les groupes fonctionnels des composés organiques (cétones, amine, dérivés nitrés, etc.) représentables de l'absorption en UV/Visible sont appelés groupement chromophores, est un groupe covalent non saturé [20]. Une espèce formée d'un squelette carboné transparent porteur d'un ou de plusieurs chromophores et chromogène. L'auxochrome est un groupe qui n'absorbe pas dans le proche UV [19].

### ❖ Chromophores isolés

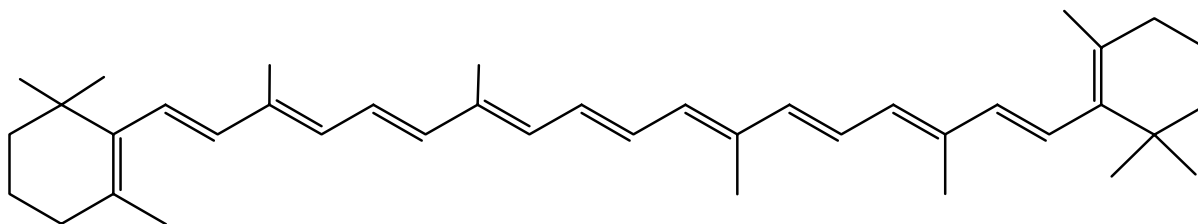
Pour une série de molécule possédant le même chromophore, la position ainsi que l'intensité des bandes d'absorption restent sensiblement constantes. Quand une molécule possède plusieurs chromophores isolés, c'est-à-dire séparés par au moins deux liaisons simples, on observe la superposition des effets individuels [7].

### ❖ Chromophores des systèmes conjugués

Quand les chromophores sont proches les uns des autres, le spectre d'absorption est déplacé vers les grandes longueurs d'onde (effet bathochrome) avec augmentation de

l'intensité d'absorption (effet hyperchrome) [12]. Un cas particulier est celui des structures organiques comportant plusieurs chromophores insaturés séparés entre eux par une liaison simple. Le spectre de ces systèmes conjugués est fortement perturbé par rapport à la simple superposition des effets produits par les chromophores isolés, ce phénomène est appelé stabilisation par résonance de l'état excité. Plus le nombre d'atomes de carbone, sur lequel le système conjugué s'étend, est élevé, plus l'écart entre le niveau des orbitales frontière diminue. Cela se traduit par un effet bathochrome très important [7].

Cet effet est à l'origine de la couleur de nombreux composés naturels dont les formules semi-développées présentent des chromophores conjugués étendus. Ainsi la couleur orangée du  $\beta$ -carotène (formule ci-dessous), provient de la réunion de onze doubles liaisons conjuguées entre elles ( $\lambda_{\max} = 497$  et  $466$  nm dans le chloroforme).



**Figure 6** : Structure de  $\beta$ -Carotène

**Tableau 4** : quelques groupes chromophores avec son ondes d'absorption et coefficient d'absorption

Nom	Chromophore	$\lambda_{\max}$ (nm)	$\epsilon_{\max}$
Amine	-NH <sub>2</sub>	195	3000
Oxime	-NOH	190	5000
Nitro	-NO <sub>2</sub>	210	3000
Nitrite	-ONO	230	1500
Nitrate	-ONO <sub>2</sub>	270	12
Nitroso	-N=O	300	100

## II.6 Effet dus aux solvants (solvatochromi)

La position et l'intensité des bandes varient quelque peu avec la nature du solvant employé. Cet effet résulte de la différence de polarité entre état non excité et état excité de toute transition électronique [9]. Ces interactions sont suffisamment nettes pour reconnaître à quel type de transition électronique on est en présence [11]. On distingue deux effets.

Si la polarité du site auquel appartient l'électron responsable de la transition observée est plus grande dans son état fondamental qu'excité, un solvant polaire stabilisera plus la forme avant absorption du photon [7]. Ainsi il faudra plus d'énergie pour provoquer la transition électronique concerné et il se forme des liaison hydrogène [19], d'où un déplacement du maximum d'absorption vers les courtes longueurs d'onde comparativement à ce qui se passerait dans un solvant non polaire. C'est l'effet hypsochrome, au contraire l'effet bathochrome est le déplacement vers les grandes longueurs d'onde.

## II.7 Effet sur le coefficient d'absorption

Lors de changement de solvant ou d'ajout de substituant sur la molécule, il peut y avoir une modification du coefficient d'extinction molaire. Si  $\varepsilon$  diminue on a alors un hypochrome, les transitions sont moins favorables et le nombre de photons absorbés diminue. L'effet inverse, pour  $\varepsilon$  qui augmente est appelé effet hyperchrome [11].

**Tableau 5** : Les différents effets de solvant ou de substituant en UV/Visible

Effet	Conséquences
Hypsochrome (Blue shift)	$\lambda_{\max}$ diminue
Bathochrome (Red shift)	$\lambda_{\max}$ augmente
Hyperchrome	$\varepsilon_{\max}$ augmente
Hypochrome	$\varepsilon_{\max}$ diminue

## II.8 Instrumentation dans UV/Visible

Globalement un spectrophotomètre est constitué de la réunion de trois parties distinctes : la source, le système dispersif (souvent conçu comme monochromateur) et le détecteur [5].

### II.8.1 Les sources lumineuses

Deux sources sont utilisées. La première pour les enregistrements dans le proche UV (dans notre cas à partir de 190 nm) est une lampe au deutérium. D'autres réalisations, nécessitant de fortes intensités, utilisent des lampes à arc au xénon. La deuxième, utilisable jusqu'à 1100, est une lampe tungstène-halogène [16].

### II.8.2 Les systèmes dispersifs

#### ➤ Appareils séquentiels

Les radiations émises par la source sont dispersées par un réseau plan ou concave qui fait partie d'un montage appelé monochromateur. Ce dispositif permet d'extraire, de la lumière émise par la source, un domaine étroit de son spectre d'émission [5].

#### ➤ Appareils simultanés

Cette catégorie d'appareils comporte simplement un réseau situé après le compartiment échantillon pour diffracter les radiations transmises. Ils fonctionnent comme des spectrographes [5].

### II.8.3 Les détecteurs

Le détecteur convertit en un signal électrique l'intensité de la radiation lumineuse qui l'atteint. Sa sensibilité dépend de la longueur d'onde. On utilise soit un tube photomultiplicateur soit un semi-conducteur (détecteur à transfert de charge ou photodiode au silicium) [7].

## II.9 Méthodes utilisées en analyse quantitative

Il n'est pas nécessaire que le composé à doser absorbe directement la lumière si on peut le transformer préalablement à la mesure en un dérivé qui, lui, comporte un chromophore exploitable. Par cet artifice, il devient possible de doser toutes sortes d'espèces chimiques dont l'absorption est initialement soit très faible, soit dans une partie du spectre ou coexistent d'autres absorptions qui interfèrent. A cette fin, la mesure d'absorbance est précédée d'une



transformation chimique qui doit être à la fois spécifique totale, rapide, reproductible et conduire à un dérivé stable en solution. C'est le principe des tests colorimétriques.

## II.10 Approche générale

Les quatre méthodes spectroscopiques fournissent des plusieurs informations sur la structure d'une molécule organique. le meilleur ordre dans lequel prendre chaque information n'est pas toujours tout à fait la même; ni est elle toujours évidente[21].

Fréquemment le meilleur endroit à commencer est avec l'ion moléculaire le spectre de masse, dont une formule moléculaire peut être déduite. En l'absence de l'ion moléculaire, une analyse de combustion fournit également cette information. Il est alors sage rapidement d'établir le nombre d'équivalence de double bande et cycle dans la molécule, afin d'avoir une idée de degré de complexité dans la structure. ceci est fait en inspectant la formule moléculaire. Si la molécule contient seulement C, H et O, alors le nombre d'équivalence de double bande et cycle (double bonds equivalent, DBE) est donné par équation[21]:

$$C_aH_bO_c \quad DBE = \frac{(2a + 2) - b}{2} \quad (II.5)$$

Le terme  $(2a+2)$  est le nombre d'hydrogènes dans un hydrocarbure saturé ayant des atomes des carbones. Puisque chaque cycle ou double liaison signifie deux atomes d'hydrogène (le cyclohexane est  $C_6H_{12}$  et éthylène,  $C_2H_4$ ). soustrayant  $b$ , présente le nombre actuel d'atome d'hydrogène, de  $(2a+2)$  et se divisant par deux donne tout le nombre équivalence de double bande et cycle dans la molécule. Il est utile pour se rappeler qu'un benzène a un total de quatre équivalentce de double liaison : trois doubleés et un cycle. Le nombre de présent bivalent des atomes ne fait aucune différence à cette somme, mais les atomes mono et trivalents font. L'atome monovalent comme hydrogène et ajoutez-les à  $b$ . quand les atomes trivalents (N trivalent, etc..), l'équation d'utilisation (II.7), la différence une de  $b$  pour chaque atome trivalent.

$$C_aH_bO_cN_d \quad DBE = \frac{(2a + 2) - (b - d)}{2} \quad (II.6)$$

Ainsi la formule  $C_5H_{11}N$  présente un équivalence de double bande; ce pourrait être i-propylimine de l'acétaldéhyde (un double bande) ou du cyclopentylamine (un cycle). Beaucoup d'autres structures sont possibles, mais nous pouvons déjà voir le cas, si un des méthodes spectroscopiques indique la présence d'un double liaison ( $C=C$ ,  $C=O$ ,  $C=N$ ). Alors il n'y a pas de cycle. Réciproquement, si les doubles bande ne sont pas clairement pas apparaître, il existe un cycle. Ce qui doit habituellement regarder très brièvement dans le spectre UV[12].

# *Chapitre III*

## *Spectrométrie Infrarouge*

## **Chapitre III : Spectrométrie Infrarouge**

### **III.1 Introduction**

La spectroscopie infrarouge (IR) est l'observation de l'absorption de radiation infrarouge par les modes de vibration moléculaire [17]. Les radiations infrarouges (IR) se situent dans la partie du spectre électromagnétique comprise entre la région visible et celle des micro-ondes. La région limitée entre 4000 et 400  $\text{cm}^{-1}$  est la plus utile d'un point de vue pratique pour le chimiste organicien, même si les régions du proche IR (12500-4000) et de l'IR lointin (700-200  $\text{cm}^{-1}$ ) ont suscité un certain intérêt[18].

### **III.2 Origine de l'absorption lumineuse dans l'infrarouge**

Le spectre a pour origine le mouvement des atomes et des liaisons[7]. Les vibrations sont des vibrations de valence le long de la liaison ou des vibrations de déformations par variation des angles de liaison[19]. Plus précisément, on fait que les atomes situés aux deux extrémités liaison sont animés d'un mouvement de vibration l'un par rapport à l'autre et que s'ils sont différentiels forment un dipole électrique oscillant à cette même fréquence[6]. Si on irradie une telle liaison non symétrique par une source lumineuse monochromatique dont la fréquence est la même que la fréquence de vibration, il y a une interaction avec le dipole électrique de la liaison dite la composante électrique de l'onde pourra transmettre son énergie à la liaison qu'il y ait accord entre sa fréquence mécanique de vibration et la fréquence électromagnétique de la radiation. Cette approche simplifiée explique qu'en l'absence d'un pôle permanent, ce qui est le cas des molécules telles  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  qui ne présente pas de couplage avec l'onde électromagnétique et qu'aucune absorption d'énergie ne se produise. Ces liaisons sont dites transparentes dans le moyen infrarouge[5].

### **III.3 Présentation des absorptions dans l'infrarouge**

Les absorptions des échantillons peuvent être réunies sur un document de base, obtenu avec un spectromètre, est appelé spectre infrarouge [10]. La figure III.1 correspond à un enregistrement effectué dans le moyen infrarouge, ce document représente pour chaque longueur d'onde le rapport des intensités transmises, avec ou sans échantillon. Ce rapport, appelé transmittance T, peut être remplacé par son pourcentage (%T) ou par l'absorbance,  $A = \log(1/T)$  [7]. Si l'étude a été faite en lumière réfléchie ou diffusée, on utilise des unités de

pseudo-absorbance. En fin, il fréquent de remplacer les longueurs par leur équivalent exprimé en nombre d'onde  $\nu$  (en  $\text{cm}^{-1}$ ) [6].

### III.4 Modèle simplifié pour les vibrations des liaisons vibrationnelles

Pour modéliser les vibrations des liaisons, on se réfère à l'oscillateur harmonique [6], ensemble formé par deux masses pouvant glisser sans frottement sur un plan et réunies par un ressort. Si on écarte les deux masses d'une valeur  $x_0$  par rapport à la distance d'équilibre  $R_e$ , et qu'on relâche la système, celui-ci se met à osciller avec une période qui est fonction de la constante de raideur du ressort  $k$  ( $\text{N m}^{-1}$ ) et des masses en présence. On calcule la fréquence à partir la relation approchée III.2 dans la quelle  $\mu$  (kg) représente la masse réduite du système [12].

$$\nu_{\text{vib}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (\text{III.1})$$

Avec

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{III.2})$$

La fréquence de vibration  $\nu_{\text{vib}}$  est donc d'autant plus élevée que la constante  $k$  est grande, c'est-à-dire que la liaison est forte. Et il s'ensuit encore que plus les masses des atomes en vibration sont petites, plus la fréquence  $\nu$  est haute [7].

Cette relation est utile pour interpréter les spectres. On établit ainsi par exemple les constantes de liaison entre les atomes de carbone

$$k(\text{C} \equiv \text{C}) > k(\text{C} = \text{C}) > k(\text{C} - \text{C})$$

En fin la théorie quantique est à prendre en considération, car l'absorption d'énergie, de rayonnement, s'effectue toujours en quanta au niveau moléculaire. Cela induit de nouvelle règle pour l'oscillateur non harmonique.

Il n'y a que des niveaux d'énergie discrets et, par conséquent, les niveaux de vibration le son aussi. L'état de vibration correspondant au nombre quantique  $\nu=0$  est appelé l'état fondamental ; son énergie n'est pas nulle (énergie de l'état fondamental). La valeur de

l'énergie absorbée par une transition vibrationnelle  $\Delta E_{VIB}$  est la différence entre deux valeurs d'énergie  $E_{n+1}$  et  $E_n$ . L'équation de Schrödinger donne :

$$E_{VIB} = h\nu_{Vib} \left( n + \frac{1}{2} \right) = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{III.3})$$

$$n=0, 1, 2, \dots$$

$$\Delta E_{VIB} = E_{n+1} - E_n = h\nu_{Vib} \quad (\text{III.4})$$

Où  $n$  est le nombre quantique vibrationnel,  $h$  la constante de Planck et  $E_{VIB}$  l'énergie de vibration.

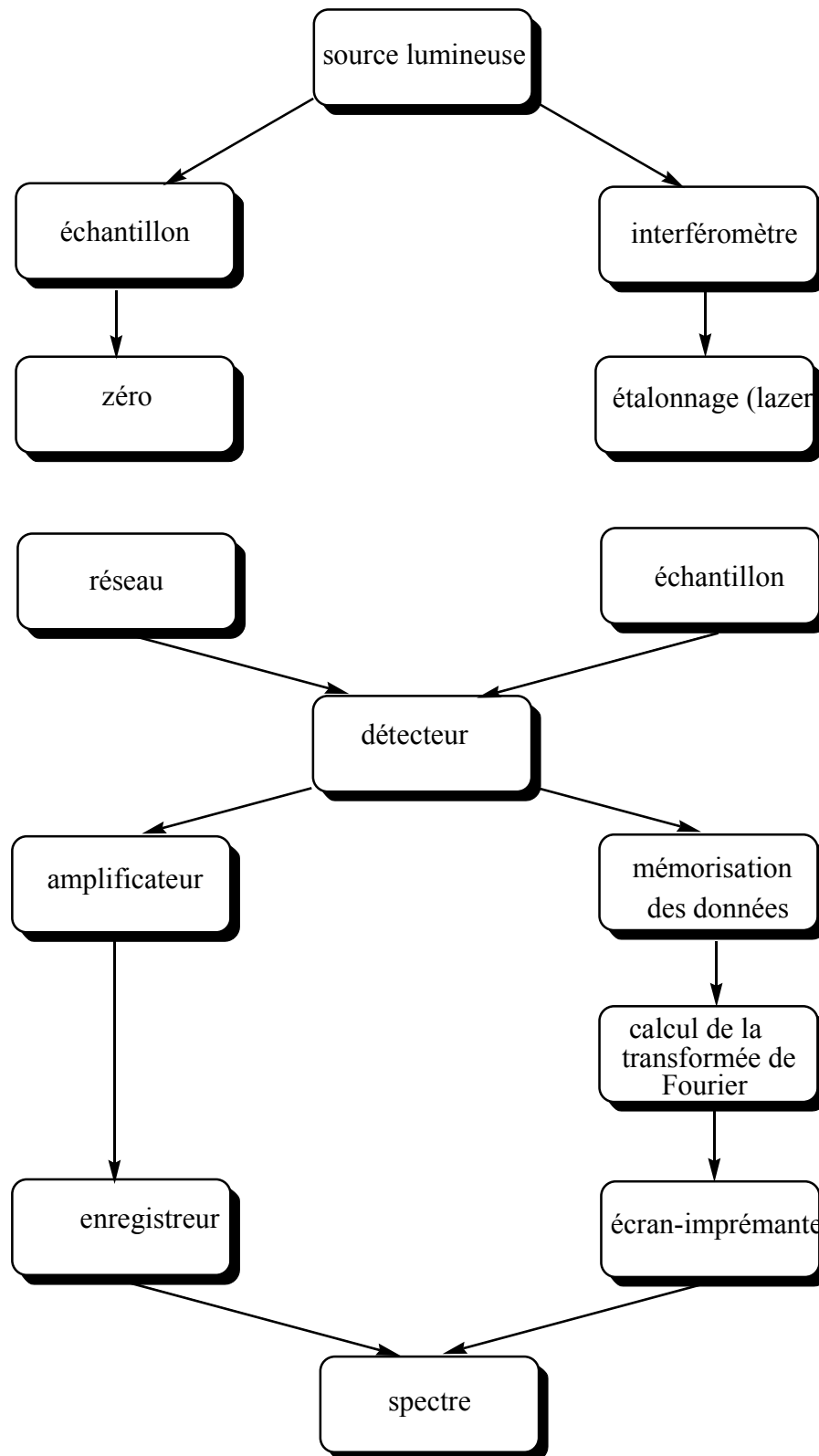
La transition de  $n=0$  à  $n=1$  est la transition de base ; de  $n=0$  à  $n=2$ , il s'agit de la première vibration supérieur qui possède environ la fréquence double. La probabilité de ces transitions, et par conséquent l'intensité des bandes d'absorption, diminue fortement avec la grandeur croissante des sauts quantiques.

En dehors des conditions quantiques, l'apparition et l'intensité des bandes d'absorption dépendent aussi du moment dipolaire de la molécule. La lumière infrarouge est absorbée seulement lorsque le moment dipolaire entre en interaction avec le vecteur électrique de la lumière [7].

### III.5 Spectromètres et analyseurs infrarouge

Deux types fondamentalement différents de spectromètres IR sont encore utilisés. Les appareils classiques à réseau de diffraction ou à prismes (scanning) ont largement été supplantés par les spectromètres à transformée de Fourier (IRTF) [20].

Le principe fonctionnel est commun aux deux types de spectromètres : une source de lumière IR émet un rayonnement qui est affaibli en fonction des fréquences par la traversée de l'échantillon. Le rayonnement résultant est enregistré dans un détecteur et transformé électroniquement en un spectre figure 7.



**Figure 7** : Montage schématique d'un spectromètre dispersif (à réseau de diffraction) (à gauche) et d'un spectromètre à transformée de Fourier (à droite)

### III.6 Spectromètre IR classiques (scanning)

Les appareils fonctionnent la plus part des temps selon le principe d'un double faisceaux : un séparateur divise le rayonnement continu issu de la source lumineuse en deux faisceaux de même intensité [6]. L'un des faisceaux traverse l'échantillon, l'autre sert de référence et traverse l'air ambiante ou, pour les mesures en solution, une cuvette contenant du solvant pur. Après ajustement du zéro optique dans le photomètre, les faisceaux sont à nouveau réunifiés [7]. Le monochromateur (un prisme ou un réseau de diffraction) décompose spectralement le rayonnement résultant. Le détecteur enregistre ainsi le spectre en fonction des longueurs d'onde (scanning) de telle façon qu'à chaque instant est enregistrée la lumière correspondant à une unique longueur d'onde. Après amplification, les signaux sont reportés sur un enregistreur sous la forme d'un spectre. La prise du spectre dure typiquement 10 minutes environ [5].

#### III.6.2 La source de radiation

La radiation infrarouge est produite en chauffant électriquement, de 1000 à 1800 °C, une source, qui est souvent un filament de Nernst ou un Globar. Le filament de Nernst est fabriqué à partir d'un alliage d'oxyde de zirconium, thorium et cérium. Le Globar est petit bâton de carbure de silicium. L'image de la source doit être plus grande que la largeur maximum des fentes [21].

#### III.6.3 Les Matériaux optiques

Pour les parois des cellules ou les fenêtres des détecteurs, on a le choix entre une douzaine de matériaux cristallisés ou amorphes dont chacun a sa plage spectrale d'utilisation. En plus de NaCl et KBr, fragile et solubles dans l'eau, on trouve l'iodure de césium (transparent jusqu'à 200 cm<sup>-1</sup>), le chlorure d'argent et même le diamant, matériaux durs et insolubles [22]

#### III.6.4 Les Détecteurs

La détection des photons de faible énergie a pendant longtemps été difficile, ce qui était la cause de la médiocre sensibilité des spectrophotomètres du moyen infrarouge. Le principe repose sur l'effet thermique des radiations dans ce domaine. Selon le type d'application ou d'instrument, on utilise des thermistors, thermocouples, thermopiles ou autres dispositifs astucieux. Pour les spectromètres à transformée de Fourier. Le détecteur qui doit pouvoir suivre les modulations rapides de l'intensité lumineuses, est un cristal



pyroélectrique ou un semi-conducteur de type photodiode, peu encombrants et légers, ils ont une faible inertie thermique et une réponse instantanée et linéaire [24].

### III.7 Spectromètres IR à transformée de Fourier

La technique à transformée de Fourier est un développement ultérieur de la spectroscopie IR grâce aux possibilités des techniques informatiques modernes d'enregistrement et du traitement de grandes quantités de données[5].

Son principe de base est la saisie simultanée de toutes les fréquences du spectre IR dans le détecteur qui rend superflu le scan des longueurs d'onde qui nécessitait du temps. Cela est possible en transformant, grâce à un interféromètre, le rayonnement de la source lumineuse multifréquencielle et d'intensité égale dans le temps en un interférogramme, qui n'est pas une fonction de la fréquence mais du temps. Après traversée par le rayonnement ainsi préparé de l'échantillon, l'interférogramme est à nouveau traduit en un spectre (donc dans le domaine des fréquences) par une opération mathématique appelée transformée de Fourier [25].

### III.8 Préparation des échantillons

Les spectres IR peuvent être obtenus à partir d'une substance dans n'importe quelle phase physique (gazeuse, liquide ou solide) ou même en solution. Le choix de la méthode appropriée s'effectue en fonction de la nature et des propriétés physiques de l'échantillon, comme le point de fusion et la solubilité [8].

#### III.8.1 Mesures en phase gazeuse

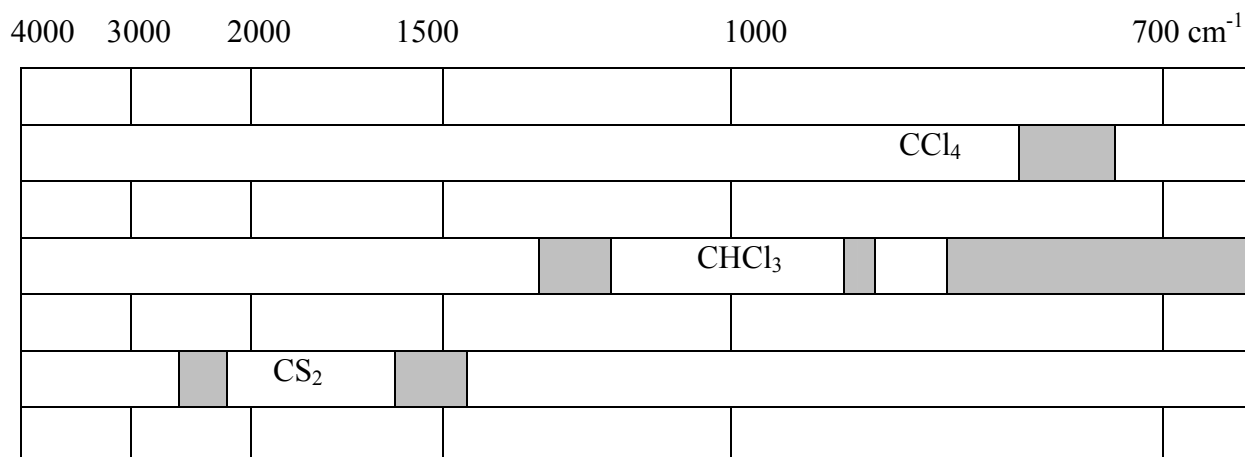
Les gaz sont mesurés dans des cellules à gaz fermées par des robinets, terminés par des plaques en NaCl perméables aux IR. En raison de la faible densité des gaz, on choisit la longueur de parcours optique à travers l'échantillon la plus grande possible (habituellement dix centièmes) [7].

#### III.8.2 Mesures à l'état liquide

Une goutte est comprimée entre des plaques planes de NaCl (perméable dans la région de 4000 à 667  $\text{cm}^{-1}$ [5]). C'est la plus simple de toutes les méthodes [5].

#### III.8.3 Mesures en solution

Le composé est dissout dans du tétrachlorométhane ou, pour une meilleure solubilité, dans du chloroforme sans alcool (solution de 1 à 5% environ). Cette solution est mise dans une cellule spéciale de chlorure de sodium.



**Figure 8** : le solvant utilisé absorbe lui-même dans les régions grisées

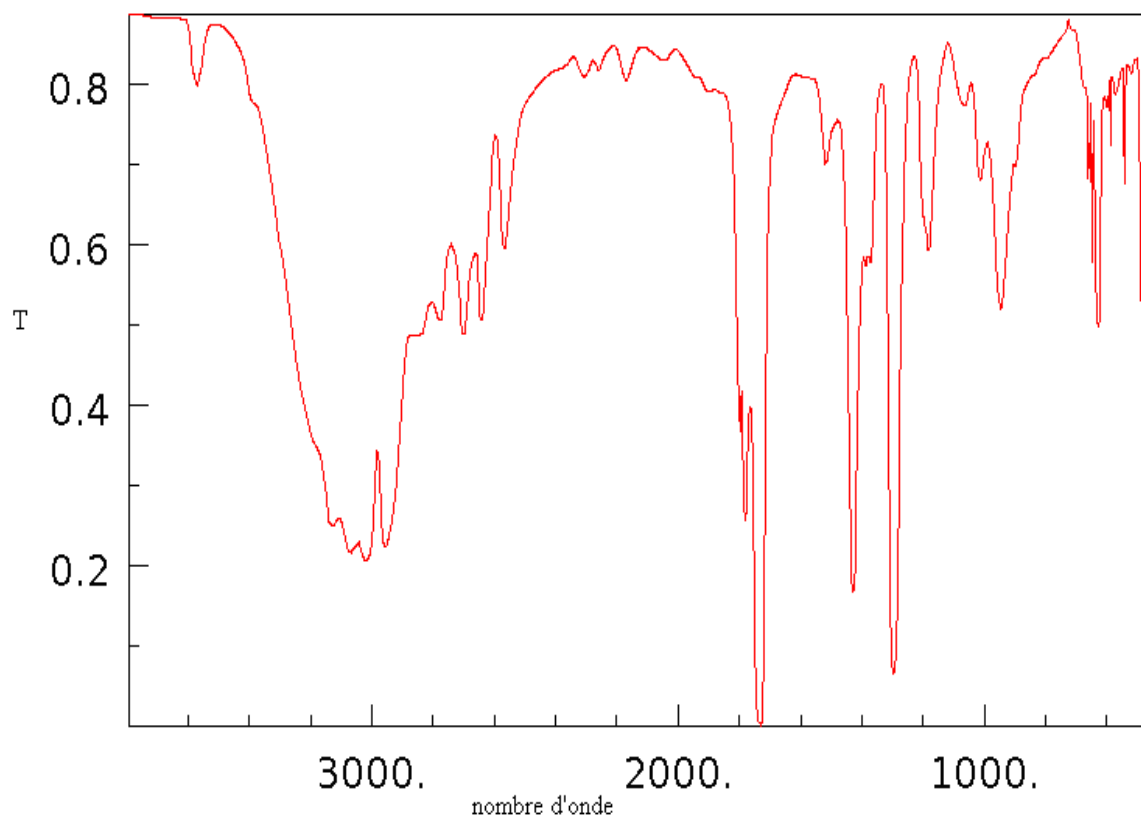
### III.8.4 Mesure à l'état solide

Environ 1 mg de substance solide est pulvérisé et mélangé finement avec une goutte d'huile de paraffine (par exemple, du Nujol) dans un petit mortier agathe. La pâte ainsi confectionnée est alors comprimée entre deux plaques de chlorure de sodium de sorte que se forme un film sans bulle [7].

### III.9 Interprétation du spectre

Il n'y a pas de règles strictes pour l'interprétation d'un spectre IR. Cependant, avant toute interprétation, certaines conditions doivent être remplies :

1. Le spectre doit présenter une résolution et une intensité adéquate.
2. Le spectre doit être celui d'un composé raisonnablement pur.
3. Le spectromètre doit être calibré pour que les bandes soient observées à leur propre fréquence ou longueur d'onde [26].
4. Le conditionnement de l'échantillon doit être spécifié. Si un solvant est employé, il faut préciser le type de solvant, la concentration de l'échantillon et l'épaisseur de la cellule devra être indiqués [26].



**Figure 9** : le spectre infrarouge de l'acide acétique

### III.10 Absorptions caractéristiques des groupes dans les molécules organiques

Un tableau des absorptions caractéristiques des groupes est présenté dans des tableaux à la fin de ce chapitre. Les intervalles pour les absorptions de groupe ont été attribués après examen de nombreux composés dans lesquels les groupes étaient présents [27-28-29-30-31]. Bien que ces intervalles soient fort bien définis, la fréquence ou longueur d'onde précise à laquelle un groupe spécifique absorbe dépend de son environnement au sein de la molécule ainsi que de son état physique.

### **III.11 Spectroscopie Raman**

A. Smectal a émis en 1923 l'hypothèse théorique de l'existence de l'effet Raman prouvé expérimentalement cinq ans plus tard par C.V. Raman.

Les spectres Raman ne sont pas enregistrés en routine et le chimiste spécialiste de chimie organique utilise rarement la spectroscopie Raman pour déterminer des structures chimiques [5]. Cependant, un spectre Raman peut être un complément utile de la spectroscopie IR dans certains problèmes, par exemples pour la mesure de solutions aqueuses, de monocristaux ou de polymères. L'application de la spectroscopie Raman est en outre devenue infiniment plus facile et rapide du fait du développement de la technologie laser [7].

Tableau 6 : Bandes d'absorption de (C—H)

m : moyen, v : variable, s : forte et w : intense (weak)

Groupement	Bande	Remarques
CH <sub>2</sub>	2960-2850 (s)	Normalement 2-3 bandes ; vibration d'élongation (C—H)
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	1470-1430 (m)	Vibration de déformation (C—H)
CH <sub>3</sub>	1390-1370 (m)	Vibration de déformation (C—H)
CH <sub>2</sub>	≈720 (w)	Vibration de déformation (C—H) symétriques Vibration de rotation CH <sub>2</sub>

Tableau 7 : Bandes d'absorption de liaison (C—H) particulières

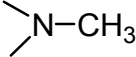
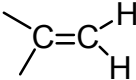
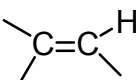
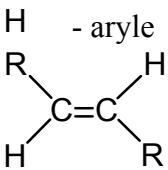
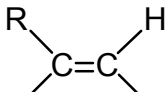
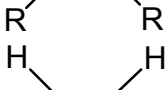
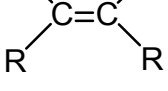
Groupement	Bande	Remarques
Cyclopropane	≈3050 (w)	vibration d'élongation (C—H)
C—H époxyde		
—CH <sub>2</sub> — halogène —CHO	290-2700 (w)	deux bandes, dont l'une au voisinage de 2700 cm <sup>-1</sup> ; la vibration d'élongation (C—H) du groupement aldéhyde a environ la même fréquence que la première vibration harmonique de la déformation (—HC=O) ; en raison de la résonance de Fermi, on observe deux bandes de même intensité ; cette double bande peut en général être utilisée pour identifier les aldéhydes
—O—CH <sub>3</sub>	2850-2810 (m)	
—O—CH <sub>2</sub> —O—	2790-2770 (m)	
	2880-2780 (m)	les groupes NCH <sub>2</sub> peuvent aussi se représenter dans cette région
—C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	1395-1385 (m)	
—C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1365 (s) ≈1380 (m)	un double presque symétrie
—O—CO—CH <sub>3</sub>	1385-1365 (s)	la forte intensité des bandes prévaut souvent dans cette région du spectre
—CO—CH <sub>3</sub>	1360-1355 (s)	

Tableau 8 : (C–H) dans les alcènes, les alcynes et les composés aromatiques


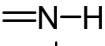
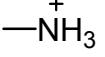



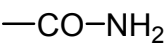
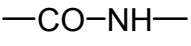
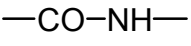
Groupement	Bandes	Remarques
$\text{—C}\equiv\text{C—H}$	$\approx 3300$ (s)	
	3095-3075 (m)	Vibration d'élongation (C–H), parfois beaucoup plus forte de l'absorption de (C–H) saturé qui se situe en dessous de $3000\text{ cm}^{-1}$
	3040-3010 (m)	
H - aryle 	3100-3000 (w)	Souvent recouverte
$\text{R—CH=CH}_2$	970-960 (s)	Vibration de déformation (C–H) « out of plan » ; si la double liaison est combinée par exemple avec un groupement C=O, elle est déplacée vers $990\text{ cm}^{-1}$
$\text{CR}_2=\text{CH}_2$	995-985 (s) et 940-900 (s)	
	895-885 (s)	
	840-790 (m)	
	730-675 (m)	

## Absorption (O—H) et (N—H)



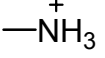
Tableau 9 : (O—H) alcoolique et phénolique

Groupement	Bandes	Remarques
Eau en solution —OH libre	3710 3650-3590 (v)	Faible ; vibration d'elongation (O—H) Souvent large, peut cependant etre faible dans quelques ponts hydrogène intramoléculaires ; plus la fréquence est faible, plus les ponts hydrogène sont forte
—OH dans les ponts H liés à sp <sup>3</sup> —O ou N (par exemple, dans les alcools)	3600-3200 (s)	
—OH dans les ponts H liés à sp <sup>2</sup> —O ou N (par exemple dans les acides carboxyliques)	3200-2500 (w)	Large ; plus la fréquence est faible, plus la liaison hydrogène est forte ; la bande peut etre parfois si large qu'elle se trouve recouverte
—O—H	1410-1260 (s)	Vibration de déformation de (C—O)
$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}-\text{OH} \\   \end{array}$	1150-1040 (s)	Vibration de d'elongation de (C—O)

**Tableau 10** : Vibration d'élongation de (N—H) dans les amines, ammonium et amides

Groupement	Bandes	Remarques
Amine et imine 	3500-3300 (m)	Les amines primaires présentent deux bandes dans cette région, les vibrations d'élongation symétrique et antisymétrique ; les amines secondaires absorbent faiblement
  dans les acides aminés aminés dans les sels d'ammonium	3130-3030 (m)  $\approx 3000$ (m)	Les bandes de (N—H) du pyrrole et de l'indole sont faibles Valeur pour l'état solide ; large ; bandes également (mais pas toujours) à 2500 et 2000 $\text{cm}^{-1}$
  	2700-2500 (m)	Valeur pour l'état solide ; large du fait de la présence de bandes de vibration harmonique
amine mono substitué 	$\approx 3500$ (m) 3400 (m)	S'abaisse de $\approx 150 \text{cm}^{-1}$ à l'état solide et quand il existe des ponts hydrogènes ; souvent plusieurs bandes à 3200-3050 $\text{cm}^{-1}$
amide N-monosubstitué 	3460-3400 (m)	Deux bandes ; s'abaissent en présence de ponts hydrogène et à l'état solide ; seulement une bande pour les lactames
	3100-3070 $\text{cm}^{-1}$	Une bande particulière, faible, à l'état solide et en présence de ponts H

**Tableau 11** : vibration de déformation de (N—H)

Groupement	Bandes	Remarques
 	1650-1560 (m) 1580-1490 (w)	Souvent trop faible pour être observée
	1600 (s) 1500 (s)	Les sels d'ammonium secondaires présentent deux bandes à 1600 $\text{cm}^{-1}$

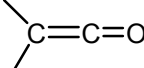
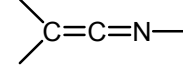
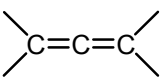


## Absorption IR des triplets liaisons et des doublets liaisons cumulés

Tableau 12 : Triple liaison X≡Y

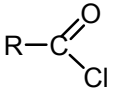
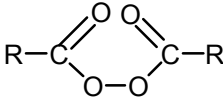
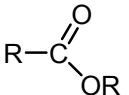
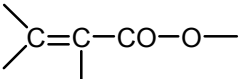
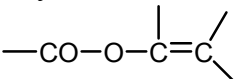
Groupement	Bandes	Remarques
—C≡C—H	3300 (s)	Vibration d'élongation (C—H)
	2140-2150 (w)	Vibration d'élongation (C≡C)
—C≡C—	2260-2150 (v)	Dans les composés polyacétyléniques, il apparaît souvent plus de bandes qu'il n'y a de liaison (C≡C)
—C≡N	2260-2200 (v)	Vibration d'élongation ; plus forte et déplacée vers le bord inférieur de la région si elle est conjuguée, occasionnellement très faible ou absente, quelques cyanhydrines par exemple ne présentent aucune absorption N
isocyanures + —N≡C <sup>-</sup>	2165-2110	
oxyde de nitriles sel de diazonium + R—N≡N <sup>-</sup>	2300-2290 ≈2250 ± 20	
	2175-2160 (s)	R aromatique

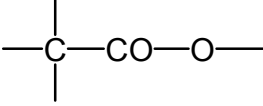
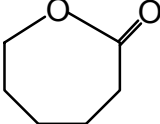
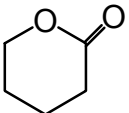
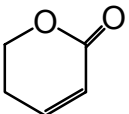
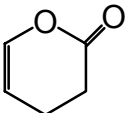
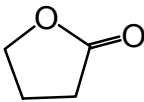
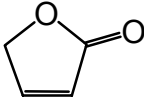
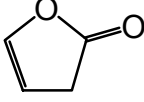
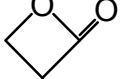
Tableau 13 : Doubles liaisons cumulées X=Y=Z

Groupement	Bandes	Remarques
Dioxyde de carbone	2349 (s)	Présent une compensation incomplète avec la mesure d'un bruit de fond, en particulier lorsque l'aire sert de référence
Isocyanates $\text{—N=C=O}$	2275-2250 (s)	Très haute intensité ; une conjugaison n'affecte pas la position
Azides $\text{—N}_3$	2160-2120 (s)	
Carbodiimides $\text{—N=C=N—}$	2155-2130 (s)	Très haute intensité ; se divise en un doublet asymétrique par conjugaison avec des groupement aryles
Cétones 	$\approx 2150$ (s)	
isothiocyanates $\text{—N=C=S}$	2140-1990 (s)	Large et très intense
dialcoyl diazoalcanes $\text{CR}_2=\text{N}=\text{N}^-$		
dialcoyl diazoacétones $\text{—CO—C(=N=N)—}$	3100-2090	
$\text{—CO—CR(=N=N)—}$	2070-2060	
cétimines 	$\approx 2000$ (s)	
allènes 	$\approx 1950$ (m)	Deux bandes, lorsqu'il y a des allène terminaux ou des groupements électro-attracteurs, comme $\text{—COOH}$

## Absorptions IR des doublets liaisons C=O, C=N, N=N, N=N

Tableau 14 : Absorption carbonyle de C=O (toutes les bandes mentionnées ont une forte intensité)

Groupement	Bandes	Remarques
Anydrides carboxyliques Saturés	1850-1800 1790-1740	Deux bandes habituellement séparées par 60 $\text{cm}^{-1}$ environ ; la bande ayant la fréquence la plus haute est plus intense dans les anhydrides acycliques, celle ayant la fréquence la plus basse est plus intense dans les anhydrides cycliques
Aryle- $\alpha$ - $\beta$ -insaturés	1830-1780 1770-1710	Une ou deux bandes de forte intensité résultant de la vibration d'élongation de (C—O)
Cycle de 5 carbones saturé	1870-1820	
Toute classe	1800-1750 1300-1050	
Chlorures d'acide		
 saturé Aryle- $\alpha$ - $\beta$ -insaturés	1815-1790 1790-1750	
Pyroxydes de diacycle		
 saturés Aryle- $\alpha$ - $\beta$ -insaturés	1820-1810 1800-1780 1805-1780 1785-1755	
Esters et lactones		
 saturés  alkyle 	1750-1735 1725-1750 1800-1750	La bande de vibration d'élongation de (C=C) est déplacée vers des fréquences plus hautes
Esters ayant des substituants électronégatifs par exemple	1770-1745	

 <p><math>\alpha</math>-cétoesters lactones (sans contrainte de cycle, comme les esters acycliques)</p>         <p><math>\beta</math>-cétoesters dans la forme énolique comportant des ponts hydrogènes toute classe</p>	<p>1750-1740</p> <p>1730</p> <p>1750</p> <p>1720</p> <p>1760</p> <p>1775</p> <p>1770-1740</p> <p><math>\approx 1800</math></p> <p>1840</p> <p><math>\approx 1650</math></p> <p>1300-1050</p>	<p>Habituellement deux fortes bandes en raison de la vibration d'élongation de (C—O)</p> <p>Forme céto-normal ; la liaison hydrogène</p>
Acide carboxyliques		Vibration d'élongation de (O—H) ; un groupement caractéristique de bandes étroites en raison des vibrations de

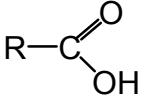
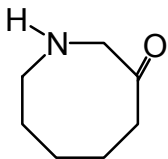
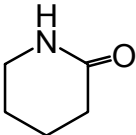
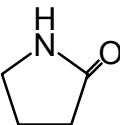
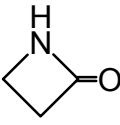
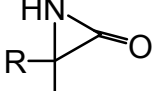
 tout types saturés  α-β-insaturés aryle- α-halogénés	3000-2500 1725-1700  1715-1700 1700-1680 1740-1720	combinaison, etc.  Le monomère absorbe autour de 1760 cm <sup>-1</sup> mais est rarement observé ; les spectres de solutions présentent occasionnellement deux bandes : celle du monomère libre et celle du dimère constitué par un pont hydrogène ; les solutions en éthers produisent une bande à 1730 cm <sup>-1</sup>
Lactames     	1669  1670  1717  1750  1850	Déplacée vers une fréquence plus basse à l'état solide

Tableau 15 : Imines, oximes, C=N

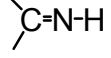

Groupement	Bandes	Remarques
   α-β-insaturés systèmes cycliques conjugués	3400-3300 (m)  1690-1640 (v) 1660-1630 1660-1480 (v)	Vibration d'élongation de (N—H) ; abaissée par la présence de ponts H  Difficile à identifier en raison des grandes différences d'intensité et de la proximité de la région de vibration d'élongation de (C=C) ; les oximes produisent en général des bandes très faibles

Tableau 16 : Composés azoïques —N=N—

Groupement	Bandes	Remarques
—N=N—	≈1575 (v)	Très faible ou inactive on IR, apparaît quelque fois en Raman
$\begin{array}{c} + \\   \\ \text{—N=N—} \\   \\ \text{O}^- \end{array}$	≈1570	

Tableau 17 : Alcènes (C=C)

Groupement	Bandes	Remarques
Non conjugués $\begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ \text{C}=\text{C} \\ \diagdown \quad \diagup \end{array}$	1680-1620	Pour être très faible, lorsqu'il sont substitués plus ou moins stériquement
conjugués avec des cycles aromatiques	≈1625 (m)	Plus intense que dans les doubles liaisons conjuguées
diènes, triènes, ect	1650 (s) et 1600 (s)	La bande de la fréquence la plus basse est habituellement plus intense et peu recouvrir ou se superposer à la bande de la fréquence plus haute
composés α,β-insaturés	1640-1590 (s)	Habituellement beaucoup plus faible que la bande (C=O)
énolesters, énoéthères, et énamines	1690-1650 (s)	

## Absorption IR caractéristiques des composés aromatiques

Tableau 18 : Groupements nitro et nitroso, nitrites (vibration d'élongation de N=O)

Groupement	Bandes	Remarques
$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}-\text{NO}_2 \\   \end{array}$	$\approx 1560$ (s) $\approx 1530$ (s)	Vibration d'élongation symétrique et asymétrique de la liaison NO ; abaissées de $\approx 30 \text{ cm}^{-1}$ par conjugaison avec des liaisons multiples
nitrate $\text{R}-\text{O}-\text{NO}_2$	$1640-1620$ (s) $1285-1270$ (s)	Vibration d'élongation symétrique et asymétrique
nitramines $\begin{array}{c} \diagdown \\ \text{N}-\text{NO}_2 \\ \diagup \end{array}$	$1630-1550$ (s) $1300-1250$ (s)	Vibration d'élongation symétrique et asymétrique
nitrites $\text{R}-\text{O}-\text{NO}_2$	$1680-1650$ (s) $1625-1610$ (s)	Les deux bandes sont attribuées aux formes s-trans et s-cis du groupement nitrite
nitrosamines $\begin{array}{c} \diagdown \\ \text{N}-\text{NO} \\ \diagup \end{array}$	$1460-1430$	
N-oxydes Aromatiques Aliphatiques	$1300-1200$ (s) $970-950$ (s)	Le N-oxyde de pyridine absorbe à $1250 \text{ cm}^{-1}$ dans les solvants apolaires ; les substituants électro-attracteur sur le cycle augmentent la fréquence et vice versa
$\text{NR}_3^+-\text{O}^-$	$1410-1430$	
$\text{NO}_3^-$	$860-800$	

**Tableau 19:** Composés aromatiques (vibration de valence de C=C)

Groupement	Bandes	Remarques
Cycles aromatiques	1600 (m) 1580 (m) 1500 (m)	Plus forte lorsqu'il y a une autre conjugaison avec le cycle arylique Habituellement la plus forte des deux ou trois bandes

**Tableau 20 :** Modèles de substitution des cycles benzéniques

Groupement	Bandes	Remarques
Cinq H voisins	770-735 (s)	Monosubstitution ; habituellement deux bandes 1,2-disubstitution 1,3-disubstitution, 1, 3,4-trisubstitution 1,3-disubstitution habituellement insuffisamment intense pour avoir une utilité
Quatre H voisins	710-685 (s)	
Trois H voisins	760-740 (s)	
Deux H voisins	800-770 (s)	
H isolé	840-800 (s)	
	900-800 (s)	



# *Chapitre IV*

*Spectrométrie de Résonance  
Magnétique Nucléaire*

## **Chapitre IV : Résonance magnétique nucléaire (RMN)**

### **IV.1 Généralités**

La résonance magnétique nucléaire est à l'origine d'une méthode utile pour résoudre les problèmes de détermination de structure des composés moléculaires organiques et de certains types de matériaux inorganiques [7]. Les spectromètres de RMN sont donc souvent localisés dans les laboratoires de recherches, mais il existe d'autres appareils de mise en œuvre simplifiée faisant appel à ce moment phénomène pour des applications de routine. Cette méthode d'étude de la manière peut être écrite en ne choisissant quelques exemples relevant du domaine de la chimie organique, l'élucidation des structures moléculaires ayant, en effet, toujours servi de moteur à son développement et aux nombreuses améliorations techniques depuis son origine [5].

La RMN tire des informations de l'interaction qui naît entre les noyaux des atomes de certains éléments présents dans l'échantillon étudié et le champ magnétique intense et constant, produit par un aimant, auquel on le soumet.

### **IV.2 Phénomène de résonance**

Dans sa formule la plus simple, la résonance magnétique nucléaire est l'absorption d'une radiation de radiofréquence par des noyaux exposés à un champ magnétique[15], c'est l'absorption résonante de rayonnements électromagnétiques radiofréquences par un système de noyau magnétique plongés dans un champ magnétique[17]. La condition nécessaire pour qu'un noyau donne un signal est qu'il possède un moment de spin angulaire et qu'il ait un moment magnétique. Chaque noyau à un moment de spin angulaire qui est déterminé expérimentalement. Le moment angulaire (spin)  $p$  est lui quantifié par un nombre quantique  $I$  et par la relation suivante :

$$p = \sqrt{I(I+1)} \cdot \frac{h}{2\pi} \quad (\text{IV.1})$$

Où  $I$  est un entier ou un demi- entier.

**Tableau 21** : Abondance naturelle de quelques éléments, son isotope et son nombre quantiques

Isotopes	Abondance naturelle	Spin I
$^1\text{H}$	99,984	$\frac{1}{2}$
$^2\text{H}$	0,016	1
$^3\text{H}$	0	$\frac{1}{2}$
$^{13}\text{C}$	1,108	$\frac{1}{2}$
$^{14}\text{N}$	99,635	1
$^{17}\text{O}$	0,037	$\frac{5}{2}$
$^{19}\text{F}$	100	$\frac{1}{2}$
$^{31}\text{P}$	100	$\frac{1}{2}$
$^{33}\text{S}$	0,74	$\frac{1}{2}$

Le moment magnétique par contre ne peut pas être prévu. Ils sont généralement mesurés en  $\mu_n$  = magnéton qui est égal à

$$\mu_n = \frac{e \cdot h}{4\pi m_p} = 5.05 \times 10^{-27} \text{ JT}^{-1} \rightarrow 1 \text{ JT}^{-1} \equiv 1 \text{ m}^2 \text{ A} \quad (\text{IV.2})$$

Avec  $m_p$  = masse du proton

Le moment magnétique nucléaire prend alors la forme suivante :

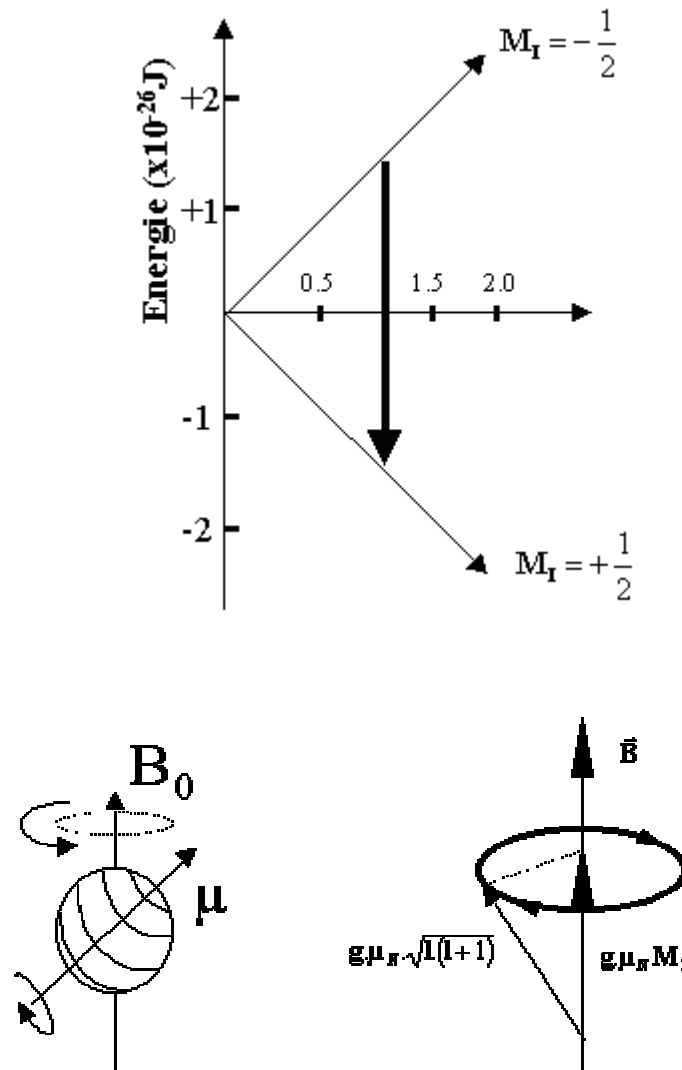
$$\mu = 2\pi \cdot g \cdot \mu_n \cdot \sqrt{I(I+1)} = \gamma \cdot h \sqrt{I(I+1)} \quad (\text{IV.3})$$

Avec  $\gamma$  le rapport gyromagnétique défini par :

$$\gamma = 2\pi \cdot \frac{g \cdot \mu_n}{h} \quad (\text{IV.4})$$

$g$  étant une valeur déterminée expérimentalement pour chaque noyau.  $g$  est généralement une valeur positive. La relation entre le moment angulaire  $p$  et le moment magnétique  $\mu$  est :

$$\mu = \left[ \frac{2\pi}{h} \right] g \cdot \mu_n \cdot p \quad (\text{IV.5})$$



**Figure 10** : Niveau énergétique d'un proton dans un champ magnétique  $B_0$

Donc quand un noyau est placé dans un champ magnétique  $B_0$ , celui-ci va tourner avec un mouvement gyroscopique, comme une toupie dans le champ gravitationnel terrestre. La fréquence de ce mouvement de précession est appelée fréquence de Larmor. L'angle pour lequel le noyau à une précession ne peut pas prendre n'importe quelle valeur, mais seulement

quelques valeurs 'autorisées'. Ces valeurs autorisées sont telles que la composante du moment angulaire dans la direction du champ est égale à la valeur  $\left[ \frac{h}{2\pi} \right] \cdot M_I$ ,  $M_I$  ayant les valeurs de  $-I$  à  $+I$ . soit pour le proton les valeurs de  $-\frac{1}{2}$  et  $+\frac{1}{2}$ .

**Tableau 22** : les valeurs de  $g$  présentent des fréquences de résonance de quelques noyaux

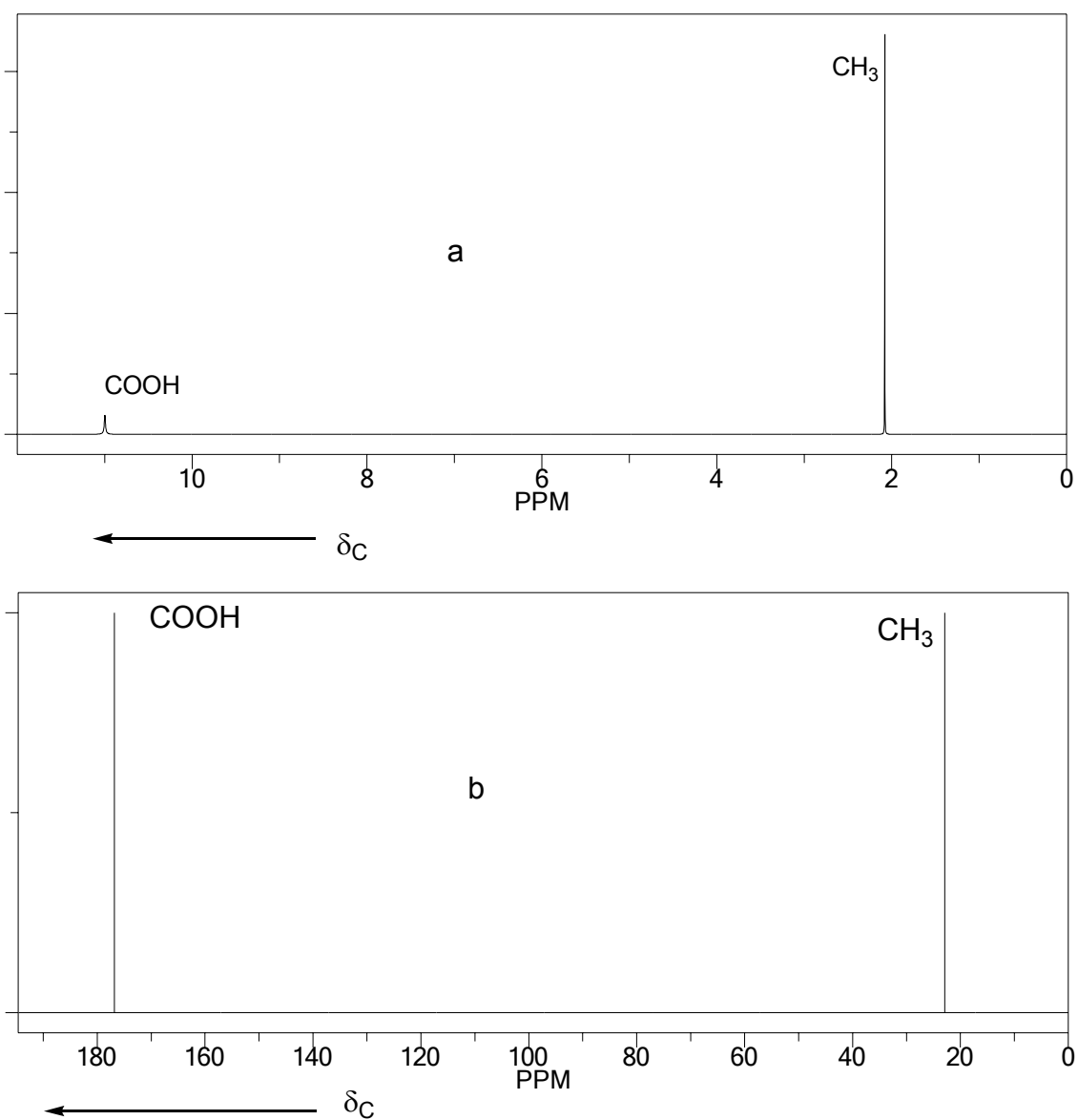
Noyau	$10^{-7} \cdot \text{Moment Gyromagnétique}$	Fréquence de Larmor (MHz)
$^1\text{H}$	26.75	42.576
$^2\text{H}$	4.11	6.536
$^{13}\text{C}$	6.73	10.705
$^{14}\text{N}$	1.93	3.076
$^{17}\text{O}$	-3.63	5.772
$^{19}\text{F}$	25.18	40.054
$^{31}\text{P}$	10.84	17.238
$^{33}\text{S}$	-	3.266

### IV.3 Déplacement chimique

La fréquence de résonance d'une espèce donnée de noyau dépend, de façon caractéristique, de l'environnement nucléaire. L'intensité effective du champ magnétique à l'emplacement du noyau se différencie de  $B_0$  et du champ induit  $\sigma B_0$  : Déplacement chimique

La fréquence de résonance d'une espèce donnée de noyau dépend, de façon caractéristique, de l'environnement nucléaire. L'intensité effective du champ magnétique à l'emplacement du noyau se différencie de  $B_0$  et du champ induit  $\sigma B_0$  :  $B_{eff} = B_0 - \sigma B_0$ . La constante d'écran, adimensionnelle  $\sigma$ , entre dans la condition de résonance :  $\nu = \left( \frac{\gamma}{2\pi} \right) \cdot B_0 (1 - \sigma)$ . Plus un noyau subit un effet écran, plus  $\sigma$  est donc grande, et plus  $B_{eff}$  est petit, cela signifie que le champ  $B_0$  utilisé pour porter le noyau à résonance doit être plus grande, pour une fréquence constante [12].

Pour déterminer la position du signal, on définit le déplacement chimique (chemical shift)  $\delta$  du noyau X la valeur numérique :  $\delta(X) = 10^6 \Delta\gamma / \gamma$  où  $\delta(TMS) = 0$ .  $\delta$  est une grandeur adimensionnelle, indépendante de la fréquence de mesure et caractéristique du noyau considéré dans son environnement [12].



**Figure 11** : a –spectre de RMN- $^1\text{H}$  de l'acide acétique dans  $\text{CDCl}_3$ ; b-spectre de RMN- $^{13}\text{C}$  de l'acide acétique dans  $\text{CDCl}_3$  [22]

### IV.3.1 Les ppm

Comment les déplacements chimiques sont faibles (par rapport à  $\bar{B}$ ) et que l'on ne peut pas prévoir le déplacement chimique, celui-ci est décrit par rapport à un standard : le TMS (Tétra-Méthyl Silane,  $(\text{CH}_3)_4\text{Si}$ ). Ce standard est ajouté aux échantillons afin de pouvoir repérer les autres pics [12]. Comme les déplacements chimiques sont proportionnels au champ magnétique imposé, le déplacement chimique est mesuré en fonction du TMS et rendu indépendant de l'appareillage par la construction du ppm ( $\delta_i$ ) qui n'a pas de dimension et est indépendant de l'appareillage.

$$\delta_i = \frac{B_{\text{TMS}} - B_i}{B_{\text{TMS}}} \cdot 10^6 \quad (\text{IV.6})$$

Où  $B_i$  et  $B_{\text{TMS}}$  sont les champs de résonance du noyau  $i$  et des noyaux du TMS.

### IV.3.2 Intensité du pic

La surface sous la courbe d'absorption d'un signal de RMN est une mesure de l'intensité de la transition. L'intégration est fournie par les spectromètres de RMN sous la forme d'une courbe en escalier. Dans les spectres de RMN- $^1\text{H}$ , l'intensité mesurée par la hauteur des niveaux est proportionnelle au nombre de noyaux  $^1\text{H}$  de la molécule qui absorbent à cet endroit du spectre[5].

### IV.4 Origine du couplage spin-spin

Le couplage spin-spin est un phénomène tellement complexe qu'il est préférable de considérer  $J$  comme un paramètre empirique plutôt que d'utiliser des valeurs calculées. Toutefois, à défaut de valeurs précises. On peut expliquer le couplage spin-spin dans les molécules en solution en considérant le mécanisme de polarisation, dans lequel l'interaction se transmet de liaison en liaison [15]. Le phénomène de couplage dépend du fait qu'il est plus favorable pour certains atomes que le noyau est un électron proche soit de spin parallèles (l'un  $\alpha$  et l'autre  $\beta$ ).

## IV. 5 Spectroscopie de RMN-<sup>1</sup>H

### IV.5.1 Préparation des échantillons et obtention des spectres

Les spectres RMN analytique sont habituellement pris en solution. A cette fin, on prépare une solution concentrée, mais non visqueuse, dans un solvant qui ne contient pas de protons. Une série de solvant deutériés. CDCl<sub>3</sub> est, de très loin, le plus utilisé, puisque le taux de deutération est toujours un peu inférieur à 100%, on doit escompter des signaux de faible intensité dus aux solvant [32].

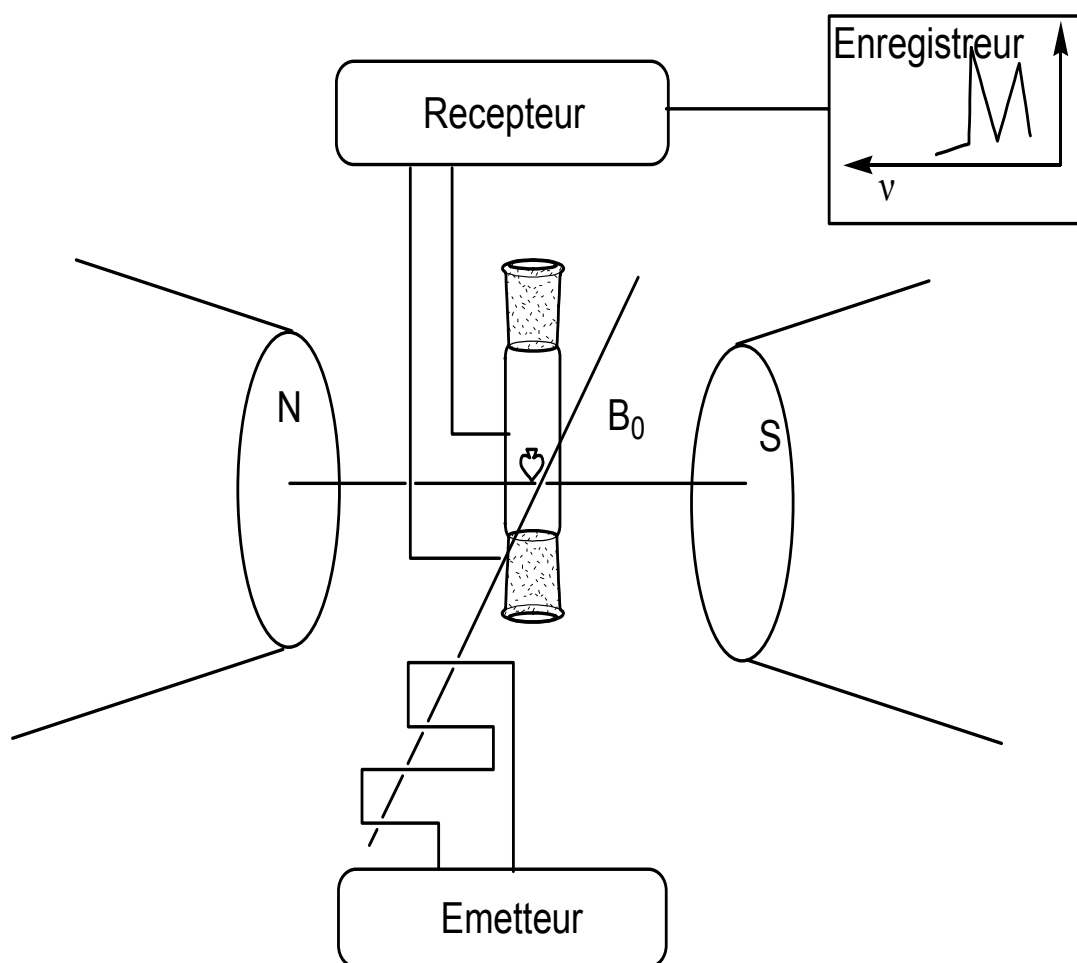
Les solvants polaires ont aussi souvent une concentration en eau mesurable, qui produit un signal H<sub>2</sub>O ou HDO.

Le choix du solvant a une influence certaine sur les déplacements chimiques mesurés.

Normalement on effectue les mesures à température ambiante. Les spectres à basses et hautes températures servent à rechercher la mobilité intramoléculaire et pour le suivi cinétique des réactions chimiques.

La figure (IV.3) représente schématiquement le montage d'un spectromètre de RMN. Le champ magnétique, créé par un électroaimant ou un aimant permanent, doit être le plus homogène possible. Cela produit une distribution des niveaux de Zeeman proportionnelle à B<sub>0</sub> [33]. L'échantillon se trouve situé entre les deux pôles, dans un tube de mesure qui tourne autour de son axe longitudinal. Les inhomogénéités de champ horizontales sont ainsi éliminées.





**Figure 12** : Construction schématique d'un spectromètre de RMN

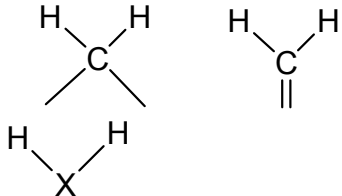
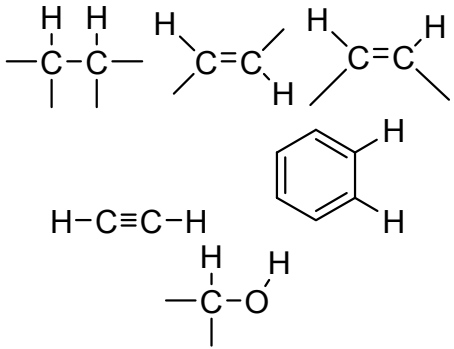
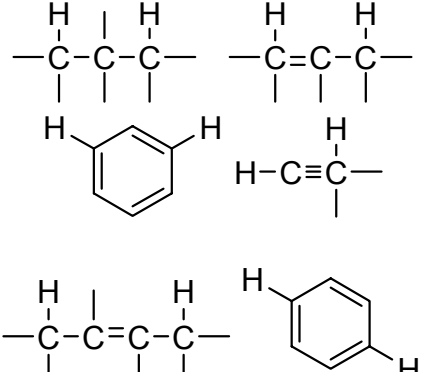
#### IV.5.2 Déplacements chimiques $^1\text{H}$

Indépendamment des influences du milieu, le déplacement chimique d'un proton est déterminé essentiellement par trois facteurs : la répartition de la couche électronique, les effets d'anisotropie et les effets stériques[6].

#### IV.5.3 Couplages $^1\text{H}, ^1\text{H}$

Le couplage magnétique de deux noyaux dans une molécule est généralement effectué par les liaisons situées entre eux . La constante de couplage  $^nJ$  sert de mesure quantitative.  $n$  indique le nombre des liaisons concernées [34]. Le tableau 23 répertorie les couplage  $^1\text{H}, ^1\text{H}$  les plus importants.

Tableau 23 : Couplage  $^1\text{H}, ^1\text{H}$ 

Type de couplage	Constante de couplage $^n J$ (ordre de grandeur)	Éléments de structure
Direct	$^1 J$ (276 Hz)	H-H
Géminal	$^2 J$ (0...30) le plus souvent négative	
Vicinal	$^3 J$ (0...20Hz) positive	
Longue distance	$^4 J$ (0...3 Hz) positive ou négative  $^5 J$ (0...2 Hz) positive	

#### IV.5.4 Corrélation des déplacements chimiques de $^1\text{H}$ avec les éléments de structure

##### ➤ Protons des groupements méthyles

le tableau 1 présente les régions des déplacement chimiques des groupements méthyles en fonction de leur environnement chimique [5-35-36].

##### ➤ Protons des groupements méthylènes

Les deux protons du groupement méthylène sont chimiquement équivalents l'orsqu'ils peuvent être intervertis l'un en l'autre en vertu d'un élément de symétrie de la molécule, il n'y a pas nécessairement équivalence magnétique lorsque l'équivalence chimique existe. le

tableau 24 présente les régions d'absorptions des protons des groupements méthylènes en fonction des substituants [5-7-37].

➤ **Protons des groupements méthynes**

Les zones d'absorptions des protons des groupements méthynes sont considérablement plus larges que celles des groupements méthyles et méthylènes. Cela provient du plus grand nombre de substitutions possibles. Les combinaisons les plus courantes de substituants sont rassemblées dans le tableau 24 [5-37-38].



➤ **Protons des cycles aromatique et hétéroaromatique**

Les protons qui sont liés aux atomes de carbone de cycles aromatiques ou hétéroaromatiques absorbent entre  $\delta = 6$  et  $\delta = 9.5$ , le pic central se situeant entre  $\delta = 7$  et  $\delta = 8$ . La variabilité, tableau 25, représente les déplacements chimiques des protons sur les cycles benzéniques monosubstitués[7].

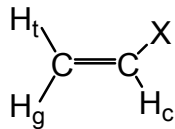
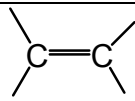
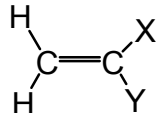
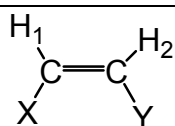
**Tableau 25** : Déplacement chimique des protons sur les cycles benzéniques monosubstitués

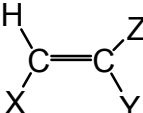
	9	,8	,6	,4	,2	8	,8	,6	,4	,2	7	,8	,6
benzène								:					
CH <sub>3</sub> (omp)									:				
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> (omp)									:				
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH(omp)									:				
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C o, m, p								:	:	:			
C=CH <sub>2</sub> (omp)								:					
C≡CH o, (mp)							:	:					
Phényle o, m, p							:	:	:				
CF <sub>3</sub> (omp)							:						
CH <sub>2</sub> Cl (omp)								:					
CHCl <sub>2</sub> (omp)								:					
CCl <sub>3</sub> o, (mp)				:			:						
CH <sub>2</sub> OH (omp)									:				
CH <sub>2</sub> OR (omp)									:				
CH <sub>2</sub> OC(=O)CH <sub>3</sub> (omp)									:				
CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> (omp)									:				
F o, m, p								:	:				
Cl (omp)								:					
Br o, (mp)								:	:				
I o, m, p						:	:	:					
OH m, p, o								:	:	:			
OR m, (op)								:	:				
OC(=O)CH <sub>3</sub> (mp),o								:	:				
OTs (mp), o								:	:				
CH(=O) o,m,p			:	:	:								
C(=O)CH <sub>3</sub> o,(mp)				:	:								
C(=O)OH o,p,m				:	:	:							
C(=O)OR o,p,m			:		:								
C(=O)Cl o,m,p			:		:								
C≡N (omp)						:							
NH <sub>2</sub> m,o,p								:	:		:		
N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> m(op)								:		:			
NHC(=O)R o						:							
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> o(mp)			:	:									
NO <sub>2</sub> o,m,p		:		:	:								
SR (omp)							:						
N=C=O (omp)								:					

➤ **Protons des doubles et triples liaisons**

Le tableau 26 fournit les enregistrements concernant les absorptions des protons des liaisons (C=C). la région de raisonance des protons acétyléniques est déplacée à environ  $1.8 \leq \delta \leq 3.2$ , vers les champs élevés, comparativement aux protons oléfiniques[6].

**Tableau 26** : les enregistrements concernant les absorptions des protons des liaisons (C=C).

	Déplacement chimique en ppm	
	H <sub>g</sub> = 5.5 à 7.5 , H <sub>t</sub> = 3.8 à 6.5, H <sub>c</sub> = 4 à 6.8	
Alkyle	H <sub>g</sub> = 4.5 à 7.5 , H <sub>t</sub> = 4.6 à 5.5, H <sub>c</sub> = 4.6 à 5.5	
 Aryle,	H <sub>g</sub> = 6 à 7 , H <sub>t</sub> = 4.8 à 5.6, H <sub>c</sub> = 4.8 à 5.6	
-COR	H <sub>g</sub> = 5.8 à 6.6 , H <sub>t</sub> = 5.4 à 6.5, H <sub>c</sub> = 5.5 à 6.5	
-OR, NR <sub>2</sub>	H <sub>g</sub> = 5.8 à 7.3 , H <sub>t</sub> = 3.8 à 4.3, H <sub>c</sub> = 4 à 4.8	
	3.4 à 6.6	
	X	Y
	Alkyle	Alkyle
	4.5 à 5.3	
	Aryle	Alkyle
	4.5 à 5.6	
	Hal ogène	Alkyle
	4.1 à 6.3	
	COR	Alkyle
	3.2 à 5	
	OR	Alkyle
	3.2 à 5	
	H <sub>1</sub> = 5 à 8, H <sub>2</sub> = 4.3 à 8.3	
	X	Y
	Alkyle	Alkyle
	H <sub>1</sub> , H <sub>2</sub> = 5 à 7	
	Aryle	Alkyle
	H <sub>1</sub> = 6.3 à 6.8, H <sub>2</sub> = 5.4 à 6.6	
	Hal ogène	Alkyle
	H <sub>1</sub> = 5.8 à 7, H <sub>2</sub> = 4.7 à 7.2	
	COR	Alkyle
	H <sub>1</sub> = 5.5 à 6.8, H <sub>2</sub> = 6 à 7.6	
	OR	Alkyle
	H <sub>1</sub> = 6.1 à 7.4 , H <sub>2</sub> = 4.3 à 6.0	
	COR	Alkyle
	H <sub>1</sub> = 6 à 7.4, H <sub>2</sub> = 7 à 8.2	
	COR	COR
	H <sub>1</sub> = H <sub>2</sub> = 6.1 à 8.0	

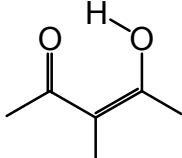
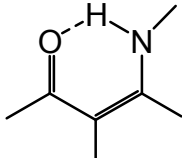
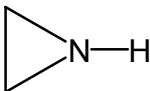
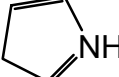
	COR $H_1=5.2 \text{ à } 7.5, H_2= 6.6 \text{ à } 8.2$ Halogène Aryle $H_1=6.2 \text{ à } 7.5, H_2= 5.6 \text{ à } 7.5$ Halogène Aryle																																				
	<table border="0"> <tr> <td></td> <td>5.1 à 8.7</td> <td></td> </tr> <tr> <td>X</td> <td>Y</td> <td>Z</td> </tr> <tr> <td>Alkyle</td> <td>Alkyle</td> <td>Alkyle</td> </tr> <tr> <td></td> <td>5.2 à 6.3</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Alkyle</td> <td>Alkyle</td> <td>Aryle</td> </tr> <tr> <td></td> <td>5.6 à 6.5</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Aryle</td> <td>Aryle</td> <td>Aryle</td> </tr> <tr> <td></td> <td>6.6 à 7.2</td> <td></td> </tr> <tr> <td>COR</td> <td>Alkyle</td> <td>Alkyle</td> </tr> <tr> <td></td> <td>5.4 à 6.3</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Alkyle</td> <td>COR</td> <td>COR</td> </tr> <tr> <td></td> <td>7 à 8.7</td> <td></td> </tr> </table>		5.1 à 8.7		X	Y	Z	Alkyle	Alkyle	Alkyle		5.2 à 6.3		Alkyle	Alkyle	Aryle		5.6 à 6.5		Aryle	Aryle	Aryle		6.6 à 7.2		COR	Alkyle	Alkyle		5.4 à 6.3		Alkyle	COR	COR		7 à 8.7	
	5.1 à 8.7																																				
X	Y	Z																																			
Alkyle	Alkyle	Alkyle																																			
	5.2 à 6.3																																				
Alkyle	Alkyle	Aryle																																			
	5.6 à 6.5																																				
Aryle	Aryle	Aryle																																			
	6.6 à 7.2																																				
COR	Alkyle	Alkyle																																			
	5.4 à 6.3																																				
Alkyle	COR	COR																																			
	7 à 8.7																																				

➤ **Protons des groupements OH, NH**

Le déplacement chimique de protons liés à des hétéroatomes comme O, N dépend fortement des conditions d'obtention des spectres (concentration, température, solvant). Souvent, les signaux sont élargis et ne présentent pas de couplage. Ce phénomène trouve son origine dans l'échange rapide intramoléculaire de protons.



**Tableau 27** : Déplacements chimiques des protons des groupements OH, NH (valeur de  $\delta$  mesurées dans  $\text{CDCl}_3$ )

	Déplacement chimique en ppm
Alkyle-OH	1 à 4.3
Aryle-OH	4.1 à 9
Hétéroaryle-OH	5 à 13.1
	9 à 17
R-CO-OH	9.31 à 13.1
R <sub>2</sub> C=N-OH	8.2 à 10.2
Alkyle-NH <sub>2</sub>	1 à 3
Aryle-NH <sub>2</sub>	3 à 5.3
Hétéroaryle-NH <sub>2</sub>	3 à 8.7
	5 à 14
RNH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	6.3 à 8.7
R <sub>2</sub> NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	8.1 à 11.3
R <sub>3</sub> NH <sup>+</sup>	7.1 à 11.2
RCO-NH <sub>2</sub>	5.3 à 9.4
R <sub>2</sub> -C=N-NH <sub>2</sub>	5.1 à 9.3
	0.1 à 0.2
	7.1 à 13.3

### ➤ Protons des acides carboxyliques

Dans les solvants non polaires même à haute dilution, les acides carboxyliques existent sous la forme de dimères stables liés par hydrogène. Dès lors, le proton carboxylique absorbe dans une région étroite caractéristique,  $\delta \approx 13.2$  à  $\approx 10$  ppm, et n'est que peu influencé par la concentration [7].

## IV.6 Spectroscopie de RMN-<sup>13</sup>C

### IV.6.1 Préparation des échantillons et enregistrement des spectres

Pour enregistrer un spectre de RMN-<sup>13</sup>C, on prépare une solution d'échantillon aussi concentrée que possible mais non visqueux. La règle générale est la suivante : un spectre de routine nécessite au moins 5 mg de composé dans 1 mL de volume de solution par signal de <sup>13</sup>C attendu [12].

Le deutérochloroforme est le solvant le plus utilisé. On emploie également des solvants deutériés pour des raisons techniques. On utilise la résonance du deutérium comme signal de lock pour stabiliser le rapport intensité de champ/fréquence dans le spectromètre. L'éclatement des multiplets résultant du couplage <sup>13</sup>C.D constitue un avantage des solvants deutériés.

Les signaux de <sup>13</sup>C, relativement intenses, des solvants protonés ou deutériés dans les solutions diluées peuvent saturer la mémoire de l'ordinateur relié au spectromètre, avant que les signaux du composé étudié acquièrent une intensité suffisante (pour être enregistrés)

On peut utiliser comme substance de référence pour fixer l'origine de l'échelle de  $\delta$  le tétraméthylsilane (TMS), comme en RMN-<sup>1</sup>H. Les signaux de <sup>13</sup>C du solvant dont on connaît le déplacement chimique suffisent cependant pour déterminer les valeurs  $\delta$  d'un échantillon de mesure.

La faible abondance naturelle de <sup>13</sup>C de 1.1% et faible moment magnétique induisent la sensibilité réduite du noyau de <sup>13</sup>C en RMN[12].

### IV.6.2 Déplacements chimiques de <sup>13</sup>C

Le déplacement chimique d'un noyau de <sup>13</sup>C dépend de manière déterminante de l'hybridation. Les atomes de carbone *sp*<sup>3</sup> absorbent aux champs les plus élevés, puis suivent les atomes de carbone *sp* et, finalement, aux champs les plus faibles, les atomes de carbone *sp*<sup>2</sup>, cette ordre est le même qu'en RMN-<sup>1</sup>H, pour le déplacement des protons saturés, acétyléniques et oléfiniques. Les déplacements chimiques des noyaux de <sup>13</sup>C et des protons qui leur sont présentent souvent ce comportement analogue en RMN-<sup>13</sup>C et en RMN-<sup>1</sup>H.

- **Les alcanes**

Nous avons, à partir du tableau 28 de corrélation général, que les groupes alcanes non substitués par des hétéroatomes absorbent vers les champs faibles jusqu'à 60 ppm à partir du TMS (le méthane absorbe entre 2 et 5 ppm à champ élevé par rapport au TMS). Au sein de

cette gamme, nous avons prédire les déplacements chimiques des atomes de  $^{13}\text{C}$  individuels dans un hydrocarbures à chaîne linéaire ou ramifié à partir des donnée de tableau 28 et de la formule donnée ci-dessous.

Ce tableau présente les paramètres d'additivité de déplacement (A) dans les hydrocarbures : l'effet  $\alpha$  de +9.1 (vers le champ faible), l'effet  $\beta$  de +9.4 ppm, l'effet  $\gamma$  de -2.5 (vers les champs forts), l'effet  $\delta$  de +0.3, l'effet  $\varepsilon$  de +0.1 et les corrections des effets de ramifications.

Les calculs de déplacements sont effectués à partir de la formule  $\delta = -2.5 + \sum nA$ , où  $\delta$  est le déplacement prédire pour un atome de carbone ; A est le paramètre de déplacements additif ; et n est le nombre d'atomes de carbone pour chaque paramètre de déplacement (-2.5 est le déplacement du  $^{13}\text{C}$  du méthane) [38,39].

Tableau 28 : Déplacement  $^{13}\text{C}$  des classes chimiques

Chromophore	Déplacement chimique en ppm
$\text{CH}_3$	10 à 30
$\text{CH}_2$	15 à 52
$\text{CH}$	25 à 58
$\text{C}$	10 à 40
Hydrocarbure alicyclique	15 à 20
$\text{C}_3\text{H}_6$	105 à 120
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{R}$	80 à 170
$\text{H}_2\text{C}=\text{C}-\text{Y}$	110 à 150
$\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{R}$	70 à 95 et 200 à 215
$\text{C}\equiv\text{C}2\text{R}$	70 à 90
$\text{C}\equiv\text{C}2\text{Y}$	20 à 95
$\text{Ar}-\text{R}$	120 à 150
$\text{Ar}-\text{Y}$	95 à 155
Hétéroaromatiques	100 à 165
$\text{R}-\text{OH}$	45 à 85
$\text{C}-\text{O}-\text{C}$	55 à 85
$\text{O}-\text{C}-\text{O}$	90 à 110
$\text{C}-\text{NR}_2$	-20 à 35
$\text{C}-\text{NO}_2$	-20 à 40
$\text{RCOH}$	35 à 55
Aldéhyde $\alpha, \beta$ insaturés	
$\text{R}-\text{C}=\text{C}-\text{CH}=\text{O}$	195 à 220
Cétone	
$\text{R}_2\text{C}=\text{O}$	175 à 195
cétone $\alpha, \beta$ insaturés	
$\text{R}-\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{O}$	195 à 220
Acide carboxylique saturé	
$\text{RCOOH}$	185 à 210
Sel $\text{RCOO}$	165 à 187
Acide carboxylique $\alpha, \beta$ insaturé	
$\text{R}-\text{C}=\text{C}-\text{COOH}$	175 à 195
Ester saturé	
$\text{R}-\text{COOR}'$	160 à 175
Ester $\alpha, \beta$ insaturé	
$\text{R}-\text{C}=\text{C}-\text{COOR}'$	150 à 170

- **Les cycloalcanes et les hétérocycles saturés**

Les déplacements chimiques des groupes CH<sub>2</sub> dans les alcanes monocycliques sont donnés au tableau 29 [5-7-40].

**Tableau 29** : déplacements chimiques des cycloalcanes (en ppm par rapport au TMS)

Composé	Déplacement (ppm)
C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	-2.9
C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	22.4
C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>	25.6
C <sub>6</sub> H <sub>12</sub>	26.9
C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	28.4
C <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	26.9
C <sub>9</sub> H <sub>18</sub>	26.1
C <sub>10</sub> H <sub>20</sub>	25.3

- **Les alcènes**

Les atomes de carbone  $sp^2$  des alcènes, substitués uniquement par des groupes alkyles, absorbent dans une région allant plus ou moins de 110 à 150 ppm à champ faible par rapport au TMS. La double liaison a un effet plutôt faible sur le déplacement des carbones  $sp^3$  de la molécule. Le signal méthyle du propène se trouve à 18.7 ppm et celui du propane à 15.8 ppm. Dans le cis-but-2-ène, les signaux méthyles sont à 12.1 ppm, comparé à 17.6 ppm dans le trans-but-2-ène, à cause de l'effet  $\gamma$ . Remarquez que l'effet  $\gamma$  sur un des groupes méthyles géminaux dans le 2-méthylbut-2-ène [38].

- **Les alcynes**

Les atomes de carbone  $sp$  des alcynes uniquement substitués par des groupes alkyles absorbent approximativement entre 65 et 90 ppm (IV.10). la liaison triple déplace les atomes de carbone  $sp^3$ , qui sont directement liés, d'environ 5 à 15 ppm à champ élevé par rapport aux alcanes correspondantes [7].

**Tableau 30:** déplacements chimiques des alcynes (en ppm)

Composé	C-1	C-2	C-3	C-4	C-5	C-6
But-1-yne	67.0	84.7				
But-2-yne		73.6				
Hex-1-yne	67.4	82.8	17.4	29.9	21.2	12.9
Hex-2-yne	1.7	73.7	76.9	19.6	21.6	12.1
Hex-3-yne	14.4	12.0	79.9			

- **Les composés aromatiques**

Les atomes de carbone du benzène, pur ou en solution dans  $\text{CDCl}_3$  ou  $\text{CCl}_4$ , absorbent à 128.5 ppm. L'atome de carbone aromatique liés à des substituants peut avoir son absorption déplacée jusqu'à 35 ppm environ. Les déplacements des atomes de carbone directement liés au substituant ont été corrélés avec l'électronégativité de celui-ci après correction des effets d'anisotropie magnétique [40].

- **Les alcools**

La substitution d'un H par un groupe OH, dans alcane, provoque des déplacements à champ faible de 35 à 52 ppm pour C-1, de 5 à 12 ppm de C-2.

- **Les éthers, les acétals et les époxydes**

Un substituant alkoxy provoque un déplacement de C-1 à champ faible un peu plus grand ( $\approx 10$  ppm de plus) que celui d'un substituant hydroxy. Cela est attribué au C-1 du groupe alkoxy qui provoque le même effet qu'un C- $\beta$  par rapport à C-1. On considère ici l'atome O comme un C- $\alpha$  par rapport à C-1.

Le carbone dioxycéné des acétals absorbe entre 88 et 112 ppm. L'oxyrane (un époxyde) absorbe entre 40.6 ppm. Les atomes de carbone alkyles éthers ont des déplacements similaire à ceux des dialkyles éthers. Remarquez le fort déplacement à champ élevé du carbone du cycle en ortho résultant de la délocalisation électronique comme dans les éthers vinylique [5].

- **Les amines**

Un groupe  $\text{NH}_2$  liés a une chaîne alkyle provoque un déplacement de C-1 vers les champs faibles d'environ 30 ppm, un déplacement vers les champs faibles d'environ 11 ppm pour C-2 et un déplacement vers les champs élevés d'environ 4 ppm pour C-3. Le groupe  $\text{NH}_3^+$  provoque un effet un peu plus faible. La N-alkylation augmente l'effet du groupe  $\text{NH}_2$  vers les champs faibles pour C-1, la position des déplacements pour des amines acycliques ou alicycliques choisies sont données au tableau 31 [41].

**Tableau 31:** Positions des déplacements des amines acycliques (pur, en ppm par rapport au TMS)

Composé	C-1	C-2	C-3	C-4
$\text{CH}_3\text{NH}_2$	26.9			
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$	35.9	17.7		
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	44.9	27.3	11.2	
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$	42.3	36.7	20.4	14.0
$(\text{CH}_3)_3\text{N}$	47.5			
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_2$	58.2	13.8		
Cyclohexalamine	50.4	36.7	25.7	25.1
N-méthylcyclohexalamine	58.6	33.3	25.1	26.3

- **Les cétones et les aldéhydes**

Les atomes de carbone  $\text{R}_2\text{C}=\text{O}$  et  $\text{RCH}=\text{O}$  absorbent dans une région caractéristique, à bas champ. L'acétone absorbe à 203.8 ppm et l'acétaldéhyde à 199.3 ppm. Le substituant alkyle sur le carbone  $\alpha$  provoque un déplacement de l'absorption  $\text{C}=\text{O}$  de 2 à 3 ppm à champ faible jusqu'à ce que les effets stériques apparaissent. Le remplacement du  $\text{CH}_3$  de l'acétone ou de l'acétaldéhyde par un groupe phényle provoque un déplacement de l'absorption  $\text{C}=\text{O}$  à champ fort [42].

- **Les acides carboxyliques**

Les groupes  $\text{C}=\text{O}$  des acides carboxyliques et de leurs dérivés sont dans la région comprise entre 150 et 185 ppm. Les nitriles absorbent dans la région comprise entre 115 et

125 ppm. Les substituants alkyles sur l'azote des amides provoquent un petit déplacement du groupe C=O vers les champs forts



*PARTIE CALCUL*

# *Chapitre I*

## *Présentation du programme*

## I.1 Introduction

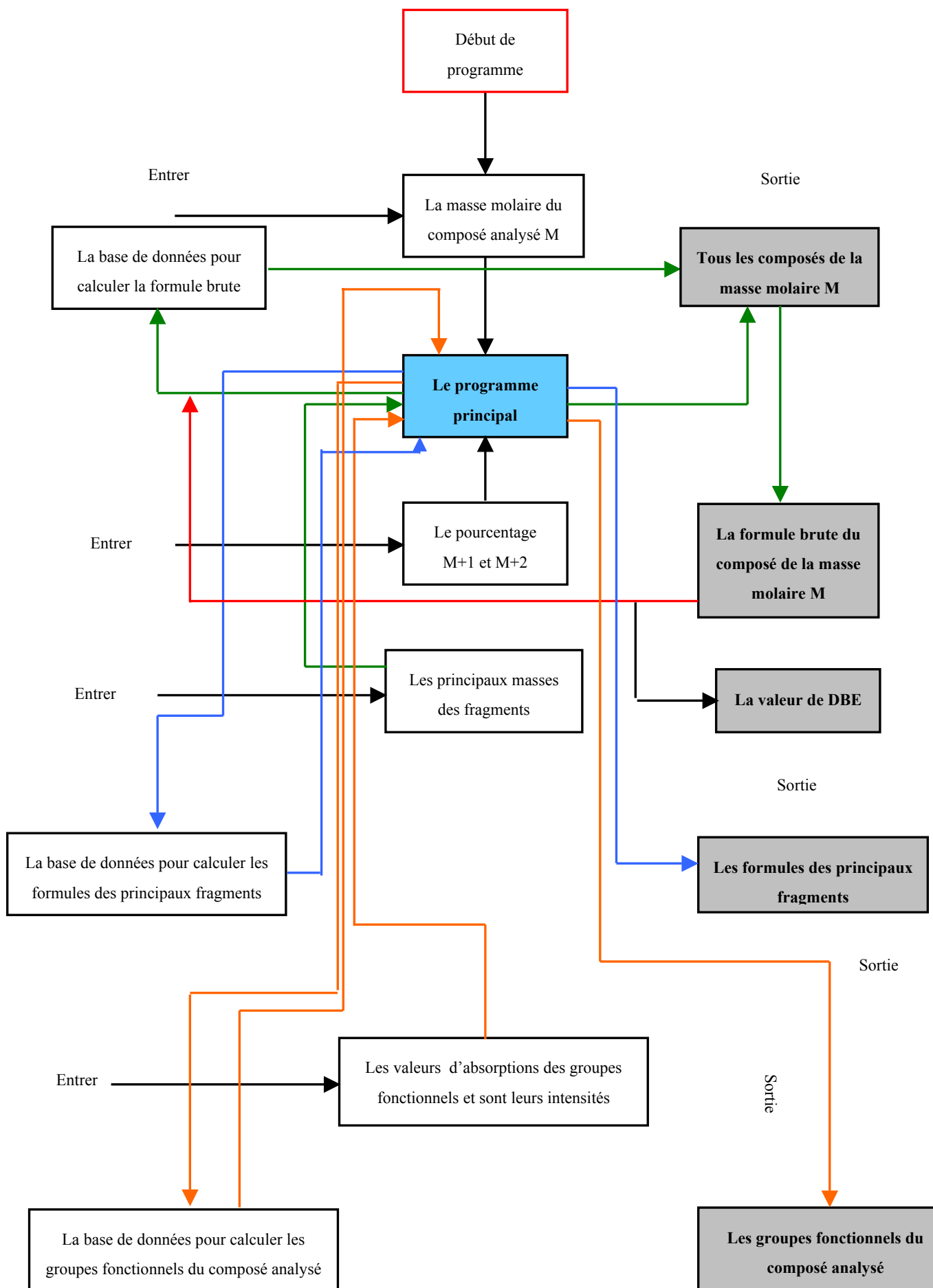
Généralement dans la recherche de la structure chimique des composés organiques on recourt le plus souvent à différentes techniques d'analyses spectrales tel que : La spectrométrie de masse[1,2], l'infrarouge[3,4], l'ultra violet[5,6], et la résonance magnétique nucléaire du proton[7] et du carbone treize[8,9], le programme développé utilise une banque de données qui aide à régler le problème de la détermination de la structure des molécules organiques à partir de leur données spectrales.

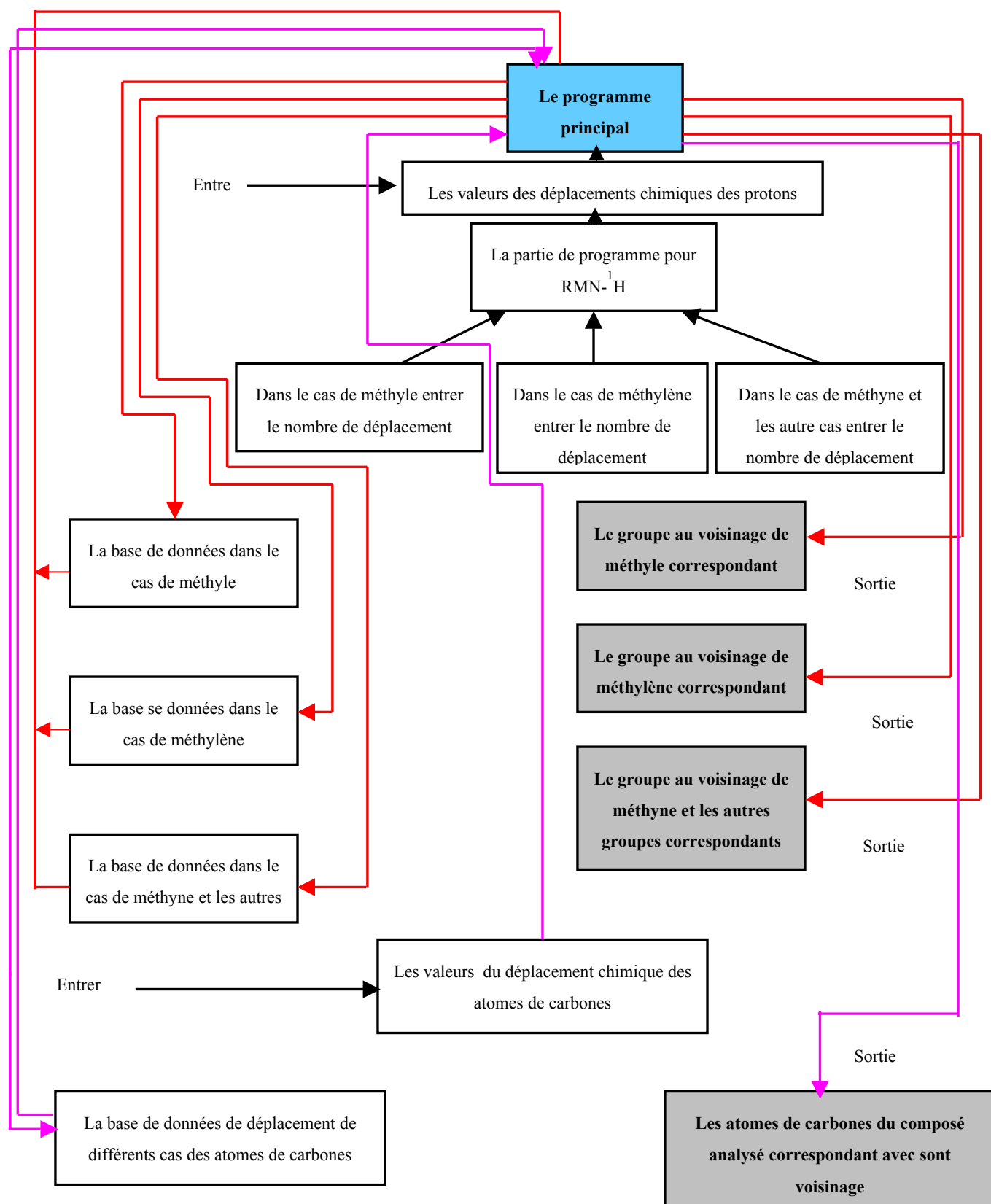
La recherche manuel sur les propriétés spectroscopiques d'un composé organique présentent plusieurs inconvénients (principalement le facteur temps).

Le programme réalisé utilise le langage Fortran 90, il est constitué de plusieurs bases de données, chacune correspondant à une méthode d'analyse. A partir des données spectrales il donne les propriétés correspondantes.

## I.2 Présentation du programme

Le programme réalisé contient plusieurs bases de données, chacune correspondant à une méthode d'analyse. Il fonctionne à partir des données spectrales couramment utilisés pour calculer les propriétés spectroscopiques des composés organiques (les composés organiques sont les composés qui contiennent seulement le carbone, l'hydrogène, l'oxygène et le nitrogène), il demande par exemple dans le cas de détermination de la formule brute d'un composé analysé la masse molaire du composé puis le pourcentage de l'isotope M+1 et M+2.





**Figure 13 :** Algorithme représentant les différentes parties et le mode de fonctionnement du programme

### **I.2.1 Calcul de la formule brute d'un composé analysé**

Dans le programme, la première étape effectuée est le calcul de la formule brute d'un composé organique quelconque de masse molaire 12 à 250. On utilise les composés de table de J.H Beynom qui contient environ de 6680 composés organiques, chaque composé caractérisé par sa masse molaire et son isotope M+1 et M+2. En entre la masse molaire du composé considéré, le programme donne la formule chimique de tous les composés organiques de table de J.H Beynom de masse molaire égale à la masse molaire entré.

Après la détermination des formules brute de tous les composés organiques de masse considérée, l'étape suivante est reportée pour calculer la formule brute exacte du composé, entre les valeurs de pourcentage des isotopes M+1 et M+2. Le programme affiche la formule brute du composé recherché après des approximations avec toutes les valeurs des isotopes des composés de masse molaire considéré.

### **I.2.2 Calcul des principaux fragments du composé**

Après la détermination de la formule du composé, on recherche sur les principaux fragments observés dans le spectre de masse. Dans cette étape on entre le nombre des fragments et le rapport m/z (masse/charge) de chaque fragment. Le programme donné les formules probables de celui-ci.

### **I.2.3 Calcul des propriétés vis-à-vis la spectroscopie ultraviolet du composé analysé**

Dans cette partie de programme on utilise les résultats précédents pour déterminer le nombre d'insaturation (DBE) du composé trouvé, déjà on connaissant la formule brute du composé trouvé. Le programme affiche automatiquement le DBE de ce composé, il détermine automatiquement le nombre de chaque éléments (carbone, hydrogène, oxygène et nitrogène s'il existe).

### **I.2.4 Calcul des principaux groupes fonctionnels du composé analysé**

Dans cette partie de programme, on calcul les principaux groupes fonctionnels du composé organique analysé. Il demande le nombre des absorptions (le nombre de pics), l'état des pics (l'état des pics programmé dans ce programme sont faible, moyen, forte et large) et le nombre d'onde de chaque absorption. Il donné les groupes fonctionnels correspondants aux absorptions.

### **I.2.5 Calcul des propriétés spectroscopiques vis-à-vis de la résonance magnétique nucléaire de proton**

Dans cette partie de programme, on détermine les chromophores liés avec le ou les protons responsables sur la résonance. Pour cette raison on utilise trois cas, le premier correspond la résonance magnétique nucléaire des protons de méthyle. C'est à dire on entre le nombre de déplacements chimiques et leurs valeurs s'il existe un groupe méthyle dans le composé analysé, le programme donne les chromophores liés avec le méthyle (les groupes formant des liaisons avec le méthyle considéré).

Le deuxième cas concernant le méthylène, comme le méthyle on entre le nombre de déplacements chimiques et leurs valeurs pour obtenir tous les groupes possibles liés avec le méthylène. Dans le cas où n'existe pas de méthylène on entre zéro pour passer directement au troisième cas.

Le troisième cas concernant le nombre de protons responsable sur la résonance est le proton de la fonction alcool, acide carboxylique, aldéhyde...

En fin on obtient tous les groupes liés avec le méthyle, le méthylène et le méthyne ou les autres cas où le nombre de proton considéré est égal un pour faciliter la détermination de la formule développée du composé analysé.

### **I.2.6 Calcul des propriétés spectroscopiques vis-à-vis de la résonance magnétique nucléaire de carbone treize**

Dans cette dernière partie de programme, on recherche les groupes liés avec les atomes de carbone. Pour cette raison on entre dans le programme le nombre de déplacements chimiques de carbone et leurs valeurs pour obtenir tous les groupes liés avec le carbone considéré et sa nature.

### I.2.6 Programme d'identification des principales propriétés spectroscopiques des composés organiques avec le langage Fortran 90

```

CHARACTER (LEN=20):: D
REAL:: MIN=100
INTEGER:: K=0
DIMENSION::
A(10000),D(10000),B(10000),C(10000),R(10000),S(10000),T(10000),DBE(10000),
DELTA(10000)
!-----
!-----
REAL,DIMENSION(200):: VALFRAG,FRA
CHARACTER(50),DIMENSION(200):: FRAGMENT
!-----
!-----
REAL      ::ND
CHARACTER(LEN=1)  ::ET1,ET2,ET3,ET4
CHARACTER(LEN=70) ::FC
CHARACTER(LEN=1)  ::ET
DIMENSION      ::ET1(100),ET2(100),ET3(100),ET4(100),ND1(100),ND2(100),FC(100)
DIMENSION      ::ND(100),ET(100)
!-----
!-----
CHARACTER(15):: DEPLMENT
REAL:: MIN3=10,DELTAUN,VALDEP1,VALEURDEP
DIMENSION:: DEPLMENT(100),VALDEP1(100),DELTAUN(100,100),VALEURDEP(100)
!-----
CHARACTER(15):: DEPLMENT1
REAL:: MIN1=10,DELTADE,VALDEP2,VALEURDEP1
DIMENSION::
DEPLMENT1(100),VALDEP2(100),DELTADE(100,100),VALEURDEP1(100)
!-----
CHARACTER(15):: DEPLMENT2
REAL:: MIN4=10,DELTA2,VALDEP3,VALEURDEP2
DIMENSION::
DEPLMENT2(100),VALDEP3(100),DELTA2(100,100),VALEURDEP2(100)
!-----
!-----
REAL      ::DEPLACARBONE,DEPCARBONE1,DEPCARBONE2
CHARACTER(80) ::GROUCARBONE
DIMENSION  ::DEPCARBONE1(100),DEPCARBONE2(100),GROUCARBONE(100)
DIMENSION  ::DEPLACARBONE(100)
!-----
!-----

```



```

OPEN(19,FILE='BEYNOME15',STATUS='OLD')
DO I=1,6677
READ(19,*) A(I),D(I),B(I),C(I),R(I),S(I),T(I)
END DO
CLOSE(19)
PRINT*, '

```

```

PRINT*, "UTILISATION DE TABLE DE BEYNOM POUR L'IDENTIFICATION DE LA
STRUCTURE DU COPMOSE"

```

```

PRINT*, '
PRINT*, "DONNER LA MASSE MOLAIRE M      "
READ*, A1
PRINT*, '
PRINT*, "LES COMPOSES ORGANIQUES CORRESPONDANTS CETTE MASSE
MOLAIRE SONT"
DO I=1,6677
IF(A(I).EQ.A1)THEN
PRINT*,D(I)
ENDIF
ENDDO
PRINT*, '

```

```

PRINT*, "ENTRER LA VALEUR DE L'ISOTOPE M+1"
READ*, B1
PRINT*, "ENTRER LA VALEUR DE L'ISOTOPE M+2"
READ*, C1

```

```

DO I=1,6677
IF(A(I).EQ.A1)THEN
DELTA(I)= ABS(B(I)-B1)
K=K+1
L=I
P=(I-(K-1))
ELSE
ENDIF
END DO
DO I=P,L
IF (DELTA(I).LT.MIN)THEN
MIN=DELTA(I)
J=I
ELSE
ENDIF
END DO

```

```

PRINT*, '
PRINT*, "LA STRUCTURE PROPABLE DU COMPOSE EST"

```

```

PRINT*, '

```

```

PRINT*, '          ', D(J)
IF(T(J)>0)THEN
DBE(J)=R(J)-(S(J)/2)+(T(J)/2)
ELSE
DBE(J)=1+R(J)-(S(J)/2)
ENDIF

PRINT*, "
PRINT*, " LA VALEUR D'EQUIVALENCE DE DOUBLE BONDE=",DBE(J)

PRINT*, "*****"
PRINT*, '
PRINT*, " IDENTIFICATION LES PRINCIPAUX FRAGMENTS DE COMPOSE "
PRINT*, "

OPEN(133,FILE='FRAGMENT155',STATUS='OLD')
DO I=1,123
READ(133,*) VALFRAG(I),FRAGMENT(I)
END DO
CLOSE(133)

PRINT*, '
PRINT*, " IDENTIFICATION DES PRINCIPAUX FRAGMENTS "
PRINT*, '

PRINT*, "C'EST DONNEES SONT RECOMMANDES COMME COMPLEMENT POUR
LES DEDUCTION STRUCTURALE"
PRINT*, "
PRINT*, " DONNER LE NOMBRE DES FRAGMENTATIONS "
READ*, M
PRINT*, " DONNER LE RAPPORT M/E DE CHAQUE FRAGMENTS"
DO J=1,M
READ*, FRA(J)
END DO
DO J=1,M
DO 50 I=1,123
IF(VALFRAG(I)==FRA(J)) THEN
WRITE(*,*) ' LA STRUCTURE IMPUTEE ', FRAGMENT(I)
ELSE
END IF
50 CONTINUE
END DO
PRINT*, "*****"
PRINT*, "
PRINT*, " CALCUL DES PRINCIPAUX GROUPES FONCTIONNELS "
PRINT*, "

```

```

OPEN(30,FILE='INFRAROUGE6',STATUS='OLD')
DO I=1,66
READ(30,*) ET1(I),ET2(I),ET3(I),ET4(I),ND1(I),ND2(I),FC(I)
END DO
CLOSE(30)
PRINT*,'DONNER LE NOMBRE DES ABSORPTIONS'
READ*,M
PRINT*,'DONNER LE NOMBRE D'ONDES"
DO J=1,M
READ*, ND(J)
END DO
PRINT*,"DONNER LES INTENSITES DES PICS"
DO J=1,M
READ*, ET(J)
END DO
DO J=1,M
DO 20 I=1,66
IF(ND1(I)<= ND(J)) THEN
IF(ND2(I)>= ND(J)) THEN
IF(ET1(I)== ET(J)) THEN

PRINT*,'LE GROUPE FONCTIONNEL EST ', FC(I)
ELSE
IF(ET2(I)==ET(J)) THEN

PRINT*,'LE GROUPE FONCTIONNEL EST ', FC(I)
ELSE
IF(ET3(I)==ET(J)) THEN

PRINT*,'LE GROUPES FONCTIONNEL EST ', FC(I)
ELSE
IF(ET4(I)==ET(J)) THEN

PRINT*,'LE GROUPE FONCTIONNEL EST ', FC(I)
PRINT*,'_____ '
ENDIF
ENDIF
ENDIF
ENDIF
ENDIF
ENDIF
ELSE
ENDIF
20 CONTINUE
END DO

```

```

PRINT*, "*****"
PRINT*, "-----"
PRINT*, "          RESONANCE MAGNETIQUE NUCLUAIRE DE PROTON          "
PRINT*, "-----"
PRINT*, " LE CAS OU LE PROTON CONSIDERE ET LE PROTON DE METHYLE "
PRINT*, "DONNER LE NOMBRE DE PICS "

READ*, M
IF(M==0)THEN
GO TO 120
ELSE
GOTO 110
END IF
110 PRINT*, "ENTRER LES VALEURS DES DEPLACEMENTS CHIMIQUES"
DO J=1,M
READ*,VALEURDEP(J)
END DO
OPEN(30,FILE='HYDROGENE11',STATUS='OLD')
DO I=1,19
READ(30,*) DEPLMENT(I),VALDEP1(I)
END DO
CLOSE(30)
DO J=1,M
K=0
MIN3=10
DO 11 I=1,19
DELTAUN(I,J)= ABS(VALDEP1(I)-VALEURDEP(J))
IF (DELTAUN(I,J)<MIN3)THEN
K=I
MIN3=DELTAUN(I,J)
DELTAUN(K,J)=DELTAUN(I,J)
ELSE
IF (DELTAUN(I,J)==MIN3)THEN
L=I

WRITE(*,*)'_____'
WRITE(*,*)'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT(L)
WRITE(*,*)'_____'
ENDIF
ENDIF
11 CONTINUE
WRITE(*,*)'_____'
WRITE(*,*) 'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT(K)
WRITE(*,*)'_____'
END DO

```

```

120 PRINT*," LE CAS OU LE PROTON CONSIDERE ET LE PROTON DE
METHYLENE "
PRINT*,"DONNER LE NOMBRE DE PICS "
READ*, M
IF(M==0)THEN
GO TO 140
ELSE
GOTO 130
END IF

130 PRINT*,"ENTRER LES VALEURS DES DEPLACEMENTS CHIMIQUES"
DO J=1,M
READ*,VALEURDEP1(J)
END DO
OPEN(40,FILE='HYDROGENE12',STATUS='OLD')
DO I=1,16
READ(40,*) DEPLMENT1(I),VALDEP2(I)
END DO
CLOSE(40)
DO J=1,M
K=0
MIN1=10
DO 22 I=1,16
DELTADE(I,J)= ABS(VALDEP2(I)-VALEURDEP1(J))
IF (DELTADE(I,J)<MIN1)THEN
K=I
MIN1=DELTADE(I,J)
DELTADE(K,J)=DELTADE(I,J)
ELSE
IF (DELTADE(I,J)==MIN1)THEN
L=I
WRITE(*,*)'_____ '
WRITE(*,*)'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT1(L)
ENDIF
ENDIF
22 CONTINUE
WRITE(*,*) 'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT1(K)
WRITE(*,*)'_____ '
END DO

140 PRINT*," LE CAS OU LE PROTON CONSIDERE ET LE PROTON DE METHYNE"
PRINT*,"DONNER LE NOMBRE DE PICS "
READ*, M
IF(M==0)THEN
GO TO 160
ELSE
GOTO 150
END IF

```

```

150 PRINT*,"ENTRER LES VALEURS DES DEPLACEMENTS CHIMIQUES"
DO J=1,M
READ*,VALEURDEP2(J)
END DO
OPEN(50,FILE='HYDROGENE13',STATUS='OLD')
DO I=1,40
READ(50,*) DEPLMENT2(I),VALDEP3(I)
END DO
CLOSE(50)
DO J=1,M
K=0
MIN4=10
DO 33 I=1,40
DELTATR(I,J)= ABS(VALDEP3(I)-VALEURDEP2(J))
IF (DELTATR(I,J)<MIN4)THEN
K=I
MIN4=DELTATR(I,J)
DELTATR(K,J)=DELTATR(I,J)
ELSE
IF (DELTATR(I,J)==MIN4)THEN
L=I
WRITE(*,*)'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT2(L)
ENDIF
ENDIF
33 CONTINUE
WRITE(*,*) 'LE GROUPE FONCTIONNEL CORRESPONDANT EST',DEPLMENT2(K)
END DO

160 PRINT*,"*****"
PRINT*,"          RESONANCE MAGNETIQUE NUCLUAIRE DE 13C          "
PRINT*,"          _____"
OPEN(300,FILE='DEPLCARBONE13',STATUS='OLD')
DO I=1,32
READ(300,*) DEPCARBONE1(I),DEPCARBONE2(I),GROUCARBONE(I)
END DO
CLOSE(300)
PRINT*,'DONNER LE NOMBRE DES PICS'
READ*,M
PRINT*,"DONNER LES VALEURS DES DEPLACEMENTS"
DO J=1,M
READ*,DEPLACARBONE(J)
END DO
DO J=1,M
DO 60 I=1,32
IF(DEPCARBONE1(I)<= DEPLACARBONE(J)) THEN
IF(DEPCARBONE2(I)>= DEPLACARBONE(J)) THEN
PRINT*,"          _____"
PRINT*,"          L'ATOME DE CARBONE CORRESPOND ", GROUCARBONE(I)
PRINT*,"          _____"

```

```
ELSE  
ENDIF  
ENDIF  
60 CONTINUE  
END DO
```

```
PRINT*, "***** _____ FIN DE PROGRAMME _____ *****"  
PRINT*, " _____ " "  
PAUSE  
END
```

### I.2.7 les bases de données utilisées dans le programme

Plusieurs bases de données sont utilisés dans le programme, une base de donnée pour le spectroscopie de masse et aussi pour calculer le nombre d'insaturation (UV), une base de donnée pour déterminer les principales fragments, une base de donnée pour calculer les groupes fonctionnels, une base de donnée pour la résonance magnétique nucléaire de proton et en une base de donnée pour la résonance magnétique nucléaire de carbone treize.

Toutes les bases de données sont réalisées comme des fichiers de même langage de programme (Fortran 90, version 5), chaque base de donnée est réalisée selon l'objectif de notre projet et la conception de programme.

♦ **La base de données réalisée pour déterminer la formule brute du composé analysé et le nombre d'insaturation (DBE)**

C'est la base la plus grande, elle constituée de sept colonne, dans la première colonne on pose les valeurs des masse molaires des composés organiques de tables de J.H Beynom, les masses molaires sont de 12 à 250

La deuxième et la troisième colonne est contient le pourcentage de l'isotope M+1 et le pourcentage de l'isotope M+2 de chaque composé, on trouve donc environ de 6680 pourcentage de valeur d'isotope.

Dans la quatrième colonne on pose toutes les formules chimiques de table de J.H Beynom, elle contient environ de 6680 composé chimique

Dans la cinquième, sixième et septième colonne on pose le nombre d'atome de carbone, de hydrogène et de nitrogène de chaque composé.



**Tableau 32 :** la base de données réalisées dans le programme pour déterminer la formule brute du composé analysé

M	Formule	M+1	M+2	N°C		
N°HN°N						
12	C	1.08	0	1	0	0
13	CH	1.1	0	1	1	0
14	N	0.38	0	0	0	1
14	CH2	1.11	0	1	2	0
15	NH	0.4	0	0	1	1
15	CH3	1.13	0	1	3	0
16	O	0.04	0.2	0	0	0
16	H2N	0.41	0	0	2	1
16	CH4	1.14	0	1	4	0
17	HO	0.06	0.2	0	1	0
17	H3N	0.43	0	0	3	1
18	H2O	0.07	0.2	0	2	0
24	C2	2.16	0.01	2	0	0
25	C2H	2.18	0.01	2	1	0
26	CN	1.46	0	1	0	1
26	C2H2	2.19	0.01	2	2	0
27	CHN	1.48	0	1	1	1
27	C2H3	2.21	0.01	2	3	0
28	N2	0.76	0	0	0	2
28	CO	1.12	0.2	1	0	0
28	CH2N	1.49	0	1	2	1
28	C2H4	2.23	0.01	2	4	0
29	HN2	0.78	0	0	1	2
29	CHO	1.14	0.2	1	1	0
29	CH3N	1.51	0	1	3	1
29	C2H5	2.24	0.01	2	5	0
30	NO	0.42	0.2	0	0	1
30	H2N2	0.79	0	0	2	2
30	CH2O	1.15	0.2	1	2	0
30	CH4N	1.53	0.01	1	4	1
30	C2H6	2.26	0.01	2	6	0
31	HNO	0.44	0.2	0	1	1
31	H3N2	0.81	0	0	3	2
31	CH3O	1.17	0.2	1	3	0
31	CH5N	1.54	0.01	1	5	1
32	O2	0.08	0.4	0	0	0
32	H2NO	0.45	0.2	0	2	1
32	H4N2	0.83	0	0	4	2
32	CH4O	1.18	0.2	1	4	0
33	HO2	0.09	0.4	0	1	0
33	H3NO	0.47	0.2	0	3	1
34	H2O2	0.11	0.4	0	2	0
36	C3	3.24	0.04	3	0	0
37	C3H	3.26	0.04	3	1	0
38	C2N	2.54	0.02	2	0	1
38	C3H2	3.27	0.04	3	2	0
39	C2HN	2.56	0.02	2	1	1
39	C3H3	3.29	0.04	3	3	0
40	CN2	1.84	0.01	1	0	2
40	C2O	2.2	0.21	2	0	0
40	C2H2N	2.57	0.02	2	2	1
40	C3H4	3.31	0.04	3	4	0
41	CHN2	1.86	0.01	1	1	2
41	C2HO	2.22	0.21	2	1	0
41	C2H3N	2.59	0.02	2	3	1
41	C3H5	3.32	0.04	3	5	0
42	N3	1.14	0	0	0	3
42	CNO	1.5	0.21	1	0	1
42	CH2N2	1.88	0.01	1	2	2
42	C2H2O	2.23	0.21	2	2	0
42	C2H4N	2.61	0.02	2	4	1
42	C3H6	3.34	0.04	3	6	0
43	HN3	1.16	0	0	1	3
43	CHNO	1.52	0.21	1	1	1
43	CH3N2	1.89	0.01	1	3	1
43	C2H3O	2.25	0.21	2	3	0
43	C2H5N	2.62	0.2	2	5	1
43	C3H7	3.35	0.04	3	7	0
44	N2O	0.8	0.2	0	0	2
44	H2N3	1.18	0	0	2	3
44	CO2	1.16	0.4	1	0	0
44	CH2NO	1.53	0.21	1	2	1
44	CH4N2	1.91	0.01	1	4	2
44	C2H4O	2.26	0.21	2	4	0

44	C2H6N	2.64	0.02	2	6	1	54	C2H2N2	2.96	0.03	2	2	2
44	C3H8	3.37	0.04	3	8	0	54	C3H2O	3.31	0.24	3	2	0
45	HN2O	0.82	0.2	0	1	2	54	C3H4N	3.69	0.05	3	4	1
45	H3N3	1.19	0	0	3	3	54	C4H6	4.42	0.07	4	6	0
45	CHO2	1.17	0.4	1	1	0	55	CHN3	2.24	0.02	1	1	3
45	CH3NO	1.55	0.21	1	3	1	55	C2HNO	2.6	0.22	2	1	1
45	CH5N2	1.92	0.01	1	5	2	55	C2H3N2	2.97	0.03	2	3	2
45	C2H5O	2.29	0.21	2	5	0	55	C3H3O	3.33	0.24	3	3	0
45	C2H7N	2.65	0.02	2	7	1	55	C3H5N	3.7	0.05	3	5	1
46	NO2	0.46	0.4	0	0	2	55	C4H7	3.43	0.07	4	7	0
46	H2N2O	0.83	0.2	0	2	2	56	N4	1.53	0.01	0	0	4
46	H4N3	1.21	0.01	0	4	3	56	CN2O	1.88	0.21	1	0	2
46	CH2O2	1.19	0.4	1	2	0	56	CH2N3	2.26	0.02	1	2	3
46	CH4NO	1.57	0.21	1	4	1	56	C2O2	2.24	0.41	2	0	0
46	CH6N2	1.94	0.01	1	6	2	56	C2H2NO	2.61	0.22	2	2	1
46	C2H6O	2.3	0.22	1	6	0	56	C2H4N2	2.99	0.03	2	4	2
47	HNO2	0.48	0.4	0	1	1	56	C3H4O	3.34	0.24	3	4	0
47	H3N2O	0.85	0.2	0	3	2	56	C3H6N	3.72	0.05	3	6	1
47	H5N3	1.22	0.01	0	5	3	56	C4H8	4.45	0.08	4	8	0
47	CH3O2	1.21	0.4	1	3	0	57	HN4	1.54	0.01	0	1	4
47	CH5NO	1.58	0.21	1	5	1	57	CHN2O	1.9	0.21	1	1	2
48	O3	0.12	0.6	0	0	0	57	CH3N3	2.27	0.02	1	3	3
48	H2NO2	0.49	0.4	0	1	1	57	C2HO2	2.26	0.41	2	1	0
48	H4N2O	0.96	0.2	0	4	2	57	C2H3NO	2.63	0.22	2	3	1
48	CH4O2	1.22	0.4	1	4	0	57	C2H5N2	3	0.03	2	5	2
48	C4	4.32	0.07	4	0	0	57	C3H5O	3.36	0.24	3	5	0
49	HO3	0.13	0.6	0	1	0	57	C3H7N	3.74	0.05	3	7	1
49	H3NO2	0.51	0.4	0	3	1	57	C4H9	4.47	0.08	4	9	0
49	C4H	4.34	0.07	4	1	0	58	N3O	1.18	0.21	0	0	3
50	H2O3	0.15	0.6	0	2	0	58	H2N4	1.56	0.01	0	2	4
50	C3N	3.62	0.05	3	0	1	58	CNO2	1.54	0.41	1	0	1
50	C4H2	4.35	0.05	4	2	0	58	CH2N2O	1.91	0.21	1	2	2
51	C3HN	3.64	0.05	3	1	1	58	CH4N3	2.29	0.02	1	4	3
51	C4H3	4.37	0.07	4	3	0	58	C2H2O2	2.27	0.42	2	2	0
52	C2N2	2.92	0.03	2	0	2	58	C2H4NO	2.65	0.22	2	4	1
52	C3O	3.28	0.24	3	0	0	58	C2H6N2	3.02	0.03	2	6	2
52	C3H2O	3.66	0.05	3	2	0	58	C3H6O	3.38	0.24	3	6	0
52	C4H4	4.39	0.07	4	4	0	58	C3H8N	3.75	0.05	3	8	1
53	C2HN2	2.94	0.03	2	1	2	58	C4H10	4.48	0.08	4	10	0
53	C3HO	3.3	0.24	3	1	0	59	HN3O	1.2	0.21	0	1	3
53	C3H3N	3.67	0.05	3	3	1	59	H3N4	1.57	0.01	0	3	4
53	C4H5	4.4	0.07	4	5	0	59	CHNO2	1.56	0.41	1	1	1
54	CN3	2.22	0.02	1	0	3	59	CH3N2O	1.93	0.21	1	3	2
54	C2NO	2.58	0.22	2	1	0	59	CH5N3	2.3	0.02	1	5	3
							59	C2H3O2	2.29	0.42	2	3	0
							59	C2H5NO	2.66	0.22	2	5	1
							59	C2H7N2	3.04	0.03	2	7	2
							59	C3H7O	3.39	0.24	3	7	0
							59	C3H9N	3.77	0.05	3	9	1

60	N2O2	0.84	0.4	0	0	2	65	H3NO3	0.55	0.6	0	3	1
60	H2N3O	1.22	0.21	0	2	3	65	C3HN2	4.02	0.6	3	1	2
60	H4N4	1.59	0.01	0	4	4	65	C4HO	4.38	0.27	4	1	0
60	CO3	1.2	0.6	1	0	0	65	C4H3N	4.75	0.9	4	3	1
60	CH2NO2	1.57	0.41	1	2	1	65	C5H5	5.48	0.12	5	5	0
60	CH4N2O	1.95	0.21	1	4	2	66	H2O4	0.19	0.8	0	2	0
60	CH6N3	2.32	0.02	1	6	3	66	C2N3	3.31	0.04	2	0	3
60	C2H4O2	2.3	0.42	2	4	0	66	C3NO	3.66	0.25	3	0	1
60	C2H6NO	2.68	0.22	2	6	1	66	C3H2N2	4.04	0.06	3	2	2
60	C2H8N2	3.05	0.03	2	8	2	66	C4H2O	4.39	0.27	4	2	0
60	C3H8O	3.41	0.24	3	8	0	66	C4H4N	4.77	0.09	4	4	1
60	C5	5.4	0.12	5	0	0	66	C5H6	5.5	0.12	5	6	0
61	HN2O2	0.86	0.4	0	1	2	67	C2HN3	3.32	0.04	2	1	3
61	H3N3O	1.23	0.21	0	3	3	67	C3HNO	3.68	0.25	3	1	1
61	H5N4	1.61	0.01	0	5	4	67	C3H3N2	4.05	0.06	3	3	2
61	CHO3	1.22	0.6	1	1	0	67	C4H3O	4.41	0.27	4	3	0
61	CH3NO2	1.59	0.41	1	3	1	67	C4H5N	4.78	0.09	4	5	1
61	CH5N2O	1.96	0.21	1	5	2	67	C5H7	5.52	0.12	5	7	0
61	CH7N3	2.34	0.02	1	7	3							
61	C2H5O2	2.32	0.42	2	5	0	68	CN4	2.61	0.03	1	0	4
61	C2H7NO	2.69	0.22	2	7	1	68	C2N2O	2.96	0.23	2	0	2
61	C5H	5.42	0.12	5	1	0	68	C2H2N3	3.34	0.04	2	2	3
							68	C3O2	3.32	0.44	3	0	0
62	NO3	0.5	0.6	0	0	1	68	C3H2NO	3.69	0.25	3	2	1
62	H2N2O2	0.87	0.4	0	2	2	68	C3H4N2	4.07	0.06	3	4	2
62	H4N3O	1.25	0.21	0	4	3	68	C4H4O	4.43	0.28	4	4	0
62	H6N4	1.62	0.01	0	6	4	68	C4H6N	4.8	0.09	4	6	1
62	CH2O3	1.23	0.6	1	2	0	68	C5H8	5.53	0.12	5	8	0
62	CH4NO2	1.6	0.41	1	4	1							
62	CH6N2O	1.98	0.21	1	6	2	69	CHN4	2.62	0.03	1	1	4
62	C2H6O2	2.34	0.42	2	6	0	69	C2HN2O	2.98	0.23	2	1	2
62	C4N	4.7	0.09	1	0	4	69	C2H3N3	3.35	0.04	2	3	3
62	C5H2	5.44	0.12	5	2	0	69	C3HO2	3.34		3	1	0
							69	C3H3	3.71	0.25	3	3	4
63	HNO3	0.51	0.6	0	1	1	69	C3H5N2	4.08	0.06	3	5	2
63	H3N2O2	0.89	0.4	0	3	2	69	C4H5O	4.44	0.28	4	5	0
63	H5N3O	1.26	0.21	0	5	3	69	C4H7N	4.82	0.09	4	7	1
63	CH3O8	1.25	0.6	1	3	0	69	C5H9	5.55	0.12	5	9	0
63	CH5NO2	1.62	0.41	1	5	1							
63	C4HN	4.72	0.09	4	1	1	70	CN3O	2.26	0.22	1	3	0
63	C5H3	5.45	0.12	5	3	0	70	CH2N4	2.64	0.03	1	2	4
							70	C2NO2	2.62	0.42	2	1	0
64	O4	0.16	0.8	0	0	0	70	C2H2N2O	3	0.23	2	2	2
64	H2NO3	0.53	0.6	0	2	1	70	C2H4N3	3.37	0.04	2	4	3
64	H4N2O2	0.91	0.4	0	4	2	70	C3H2O2	3.35	0.44	3	2	0
64	CH4O3	1.26	0.6	1	4	0	70	C3H4NO	3.73	0.25	3	4	1
64	C3N2	4	0.06	3	0	2	70	C3H6N2	4.1	0.07	3	6	2
64	C4O	4.36	0.27	4	0	0	70	C4H6O	4.46	0.28	4	6	0
64	C4H2N	4.74	0.09	4	2	1	70	C4H8N	4.83	0.09	4	8	1
64	C5H4	5.47	0.12	5	4	0	70	C5H10	5.56	0.13	5	10	0
65	HO4	0.17	0.8	0	1	0	71	CHNO3	2.28	0.22	1	1	1

71	CH3N4	2.65	0.03	1	3	4	74	C3H10N2	4.16	0.07	3	10	2
71	C2HNO2	2.64	0.42	2	1	1	74	C3H10O	4.52	0.28	3	10	0
71	C2H3N2O	3.01	0.23	2	3	2	74	C5N	5.78	0.14	5	0	1
71	C2H5N3	3.39	0.04	2	5	3	74	C6H2	6.52	0.18	6	2	0
71	C3H3O2	3.37	0.44	3	3	0							
71	C3H5NO	3.74	0.25	3	5	1	75	HN3O2	1.24	0.41	1	0	3
71	C3H7N2	4.12	0.07	3	7	2	75	H3N4O	1.61	0.21	0	3	4
71	C4H7O	4.47	0.28	4	7	0	75	CHNO3	1.6	0.61	1	1	1
71	C4H9N	4.85	0.09	4	9	1	75	CH3N2O2	1.97	0.41	1	3	2
71	C5H11	5.58	0.13	5	11	0	75	CH5N3O	2.34	0.22	1	5	3
							75	CH7N4	2.72	0.03	1	7	4
72	N4O	1.56	0.21	0	0	4	75	C2H3O3	2.33	0.62	2	3	0
72	CN2O2	1.92	0.41	1	0	2	75	C2H5NO2	2.7	0.43	2	5	1
72	CH2N3O	2.3	0.22	1	2	3	75	C2H7N2O	3.08	0.23	2	7	2
72	CH4N4	2.67	0.03	1	4	4	75	C2H9N3	3.45	0.05	2	9	3
72	C2O3	2.28	0.62	2	0	0	75	C3H7O2	3.43	0.44	3	7	0
72	C2H2NO2	2.65	0.42	2	2	1	75	C3H9NO	3.81	0.25	3	9	1
72	C2H4N2O	3.03	0.23	2	4	2	75	C5HN	5.8	0.14	5	1	1
72	C2H6N3	3.4	0.04	2	6	3	75	C6H3	8.53	0.18	6	3	0
72	C3H4O2	3.38	0.44	3	4	0							
72	C3H6NO	3.76	0.25	3	6	1	76	N2O3	0.88	0.6	0	0	2
72	C3H8N2	4.13	0.07	3	8	2	76	H2N3O2	1.25	0.41	0	2	3
72	C4H8O	4.49	0.28	4	8	0	76	H4N4O	1.63	0.21	0	4	4
72	C4H10N	4.86	0.09	4	10	1	76	CO4	1.24	0.8	1	0	0
72	C5H12	5.6	0.13	5	12	0	76	CH2NO3	1.61	0.61	1	2	1
72	C6	4.48	0.18	6	0	0	76	CH4N2O2	1.99	0.41	1	4	2
							76	CH6N3O	2.36	0.22	1	6	3
73	HN4O	1.58	0.21	0	1	4	76	CH8N4	2.73	0.03	1	8	4
73	CHN2O2	1.94	0.41	1	1	2	76	C2H4O3	2.34	0.62	2	4	0
73	CH3N3O	2.31	0.22	1	3	3	76	C2H6NO2	2.72	0.43	2	6	1
73	CH5N4	2.69	0.03	1	5	4	76	C2H8N2O	3.09	0.24	2	8	2
73	C2HO3	2.29	0.62	2	1	0	76	C3H8O2	3.45	0.44	3	8	0
73	C2H3NO2	2.67	0.42	2	3	1	76	C4N2	5.09	0.1	4	0	2
73	C2H5N2O	3.04	0.23	2	5	2	76	C5O	5.44	0.32	5	0	0
73	C2H7N3	3.42	0.04	2	7	3	76	C5NH2	5.82	0.14	5	2	1
73	C3H5O2	3.4	0.44	3	5	0	76	C6H4	6.55	0.18	6	4	0
73	C3H7NO	3.77	0.25	3	7	1							
73	C3H9N2	4.15	0.07	3	9	2	77	HN2O3	0.9	0.6	0	1	2
73	C4H9O	4.51	0.28	4	9	0	77	H3N3O2	1.27	0.41	0	3	3
73	C4H11N	4.88	0.09	4	11	1	77	H5N4O	1.64	0.21	0	5	4
73	C6H	6.5	0.18	6	1	0	77	CHO4	1.25	0.8	1	1	0
							77	CH3NO3	1.63	0.61	1	3	1
74	N3O2	1.22	0.41	0	0	3	77	CH5N2O2	2	0.41	1	5	2
74	H2N4O	1.6	0.21	0	2	4	77	CH7N3O	2.38	0.22	1	7	3
74	CNO3	1.58	0.61	1	0	3	77	C2H5O3	2.36	0.62	2	5	0
74	CH2N2O2	1.95	0.41	1	2	2	77	C2H7NO2	2.73	0.43	2	7	1
74	CH4N3O	2.33	0.22	1	4	3	77	C4HN2	5.1	0.11	1	4	2
74	CH6N4	2.7	0.03	1	6	4	77	C5HO	5.46	0.32	5	1	0
74	C2H2O3	2.31	0.62	2	2	0	77	C3H3N	5.83	0.14	3	3	1
74	C2H4NO2	2.68	0.42	2	4	1	77	C6H5	6.56	0.18	6	5	0
74	C2H6N2O	3.06	0.23	2	6	2							
74	C2H8N3	3.43	0.05	2	8	3	78	NO4	0.54	0.8	0	0	1
74	C3H6O2	3.42	0.44	3	6	0	78	H2N2O3	0.91	0.6	0	2	2
74	C3H8NO	3.79	0.25	3	8	1	78	H4N3O2	1.29	0.41	0	4	3

78	H6N4O	1.66	0.21	0	6	4	82	C4H4NO	4.81	0.29	4	4	1
78	CH2O4	1.27	0.8	1	2	0	82	C4H6N2	5.18	0.11	4	6	2
78	CH4NO3	1.64	0.61	1	4	1	82	C5H6O	5.54	0.32	5	6	0
78	CH6N2O2	2.02	0.41	1	6	2	82	C5H8N	5.91	0.14	5	8	1
78	C2H6O3	2.37	0.62	2	6	0	82	C6H10	6.64	0.19	6	10	0
78	C3N3	4.39	0.08	3	0	3							
78	C4NO	4.74	0.29	4	0	1	83	C2HN3O	3.36	0.24	2	1	3
78	C4H2N2	5.12	0.11	4	2	2	83	C2H3N4	3.74	0.06	2	3	4
78	C5H2O	5.47	0.32	5	2	0	83	C3HNO2	3.72	0.45	3	1	1
78	C5H4N	5.85	0.14	5	4	1	83	C3H3N2O	4.09	0.27	3	3	2
78	C6H6	6.58	0.18	6	6	0	83	C3H5N3	4.47	0.08	3	5	3
							83	C4H3O2	4.45	0.48	4	3	0
79	HNO4	0.55	0.8	0	1	1	83	C4H5NO	4.82	0.22	4	5	1
79	H3N2O3	0.93	0.6	0	3	2	83	C4H7N2	5.2	0.11	4	7	2
79	H5N3O2	1.3	0.41	0	5	3	83	C5H7O	5.55	0.33	5	7	0
79	CH3O4	1.28	0.8	1	3	0	83	C5H9N	5.93	0.15	5	9	1
79	CH5NO3	1.66	0.61	1	5	1	83	C6H11	6.66	0.19	6	11	0
79	C3HN3	1.4	0.08	1	3	1							
79	C4HNO	4.76	0.29	4	1	1	84	CN4O	2.65	0.23	1	0	4
79	C4H3N2	5.13	0.11	4	3	2	84	C2N2O2	3	0.43	2	0	2
79	C5H3O	5.49	0.32	5	3	0	84	C2H2N3O	3.38	0.24	2	2	3
79	C5H5N	5.86	0.14	5	5	1	84	C2H4N4	3.75	0.06	2	4	4
79	C6H7	6.6	0.18	6	7	0	84	C3O3	3.36	0.64	3	0	0
							84	C3H2NO2	3.73	0.45	3	2	1
80	H2NO4	0.57	0.8	0	2	1	84	C3H4N2O	4.11	0.27	3	4	2
80	H4N2O3	0.94	0.6	0	4	2	84	C3H6N3	4.48	0.08	3	6	3
80	CH4O4	1.3	0.8	1	4	0	84	C4H4O2	4.46	0.48	4	4	0
80	C2N4	3.29	0.05	2	0	4	84	C4H6NO	4.84	0.29	4	6	1
80	C3N2O	4.04	0.26	3	0	2	84	C4H8N2	5.21	0.11	4	8	2
80	C3H2N3	4.42	0.08	3	2	3	84	C5H8O	5.57	0.33	5	8	0
80	C4O2	4.4	0.47	4	0	0	84	C5H10N	5.94	0.15	5	10	1
80	C4H2NO	4.77	0.29	4	2	1	84	C6H12	6.68	0.19	6	12	0
80	C4H4N2	5.15	0.11	4	4	2	84	C7	7.56	0.25	7	0	0
80	C5H4O	5.51	0.32	5	4	0							
80	C5H6N	5.88	0.14	5	6	1	85	CHN4O	2.66	0.23	1	1	4
80	C6H8	6.61	0.18	6	8	0	85	C2HN2O2	3.02	0.43	2	1	2
							85	C2H3N3O	3.39	0.24	2	3	3
81	H3NO4	0.59	0.8	0	3	1	85	C2H5N4	3.77	0.06	2	5	4
81	C2HN4	3.7	0.05	2	1	4	85	C3HO3	3.38	0.64	3	1	0
81	C3HN2O	4.06	0.26	3	1	2	85	C3H3NO2	3.75	0.45	3	3	1
81	C3H3N3	4.43	0.08	3	3	3	85	C3H5N2O	4.12	0.27	3	5	2
81	C4HO2	4.42	0.48	4	1	0	85	C3H7N3	4.5	0.08	3	7	3
81	C4H3NO	4.79	0.29	4	3	1	85	C4H5O2	4.48	0.48	4	5	0
81	C4H5N2	5.17	0.11	4	5	2	85	C4H7NO	4.85	0.29	4	7	1
81	C5H5O	5.52	0.32	5	5	0	85	C4H9N2	5.23	0.11	4	9	2
81	C5H7N	5.9	0.14	5	7	1	85	C5H9O	5.59	0.33	5	9	0
81	C6H9	6.63	0.18	6	9	0	85	C5H11N	5.96	0.15	5	11	1
							85	C6H13	6.69	0.19	6	13	0
82	C2N3O	3.34	0.24	2	3	0	85	C7H	7.58	0.25	7	1	0
82	C2H2N4	3.72	0.05	2	2	4							
82	C3NO2	3.7	0.45	3	0	1	86	CN3O2	2.3	0.42	1	3	0
82	C3H2N2O	4.08	0.26	3	2	2	86	CH2N4O	2.68	0.23	1	2	4
82	C3H4N3	4.45	0.08	3	4	3	86	C2NO3	2.66	0.62	2	0	3
82	C4H2O2	4.43	0.48	4	2	0	86	C2H2N2O2	3.03	0.43	2	2	2

86	C2H4N3O	0.41	0.24	2	4	3							
86	C2H6N4	0.78	0.06	2	6	4	89	HN4O2	1.62	0.41	0	1	4
86	C3H2O3	3.39	0.64	3	2	0	89	CHN2O3	1.98	0.61	1	1	2
86	C3H4NO2	3.77	0.45	3	4	1	89	CH3N3O2	2.35	0.42	1	3	3
86	C3H6N2O	4.14	0.27	3	6	2	89	CH5N4O	2.73	0.23	1	5	4
86	C3H8N3	4.51	0.08	3	8	3	89	C2HO4	2.33	0.82	2	1	0
86	C4H6O2	4.5	0.48	4	6	0	89	C2H3NO3	2.71	0.63	2	3	1
86	C4H8NO	4.87	0.3	4	8	1	89	C2H5N2O2	3.08	0.44	2	5	2
86	C4H10N2	5.25	0.11	4	10	2	89	C2H7N3O	3.46	0.25	2	7	3
86	C5H10O	5.6	0.33	5	10	0	89	C2H9N4	3.83	0.06	2	9	4
86	C5H12N	5.98	0.15	5	12	12	89	C3H5O3	3.44	0.64	3	5	0
86	C6H14	6.71	0.19	6	14	0	89	C3H7NO2	3.81	0.46	3	7	1
86	C6N	6.87	0.2	6	0	1	89	C3H9N2O	4.19	0.27	3	9	2
86	C7H2	7.6	0.25	7	2	0	89	C3H11N3	4.56	0.08	3	1	3
							89	C4H9O2	4.54	0.48	4	9	0
87	CHN3O2	2.32	0.42	1	1	3	89	C4H11NO	4.92	0.3	4	11	1
87	CH3N4O	2.69	0.23	1	3	4	89	C5HN2	6.18	0.16	5	1	2
87	C2HNO3	2.68	0.62	2	1	1	89	C6HO	6.54	0.38	6	1	0
87	C2H3N2O2	3.05	0.43	2	3	2	89	C6H3N	6.91	0.2	6	3	1
87	C2H5N3	3.42	0.25	2	5	3	89	C7H5	7.64	0.25	7	5	0
87	C2H7N4	3.8	0.06	2	7	4							
87	C3H3O3	3.41	0.64	3	3	0	90	N3O3	1.26	0.61	0	0	3
87	C3H5NO2	3.78	0.45	3	5	1	90	H2N4O2	1.64	0.41	0	2	4
87	C3H7N2O	4.16	4.27	3	7	2	90	CNO4	1.62	0.81	1	0	1
87	C3H9N3	4.53	0.08	3	9	3	90	CH2N2O3	1.99	0.61	1	2	2
87	C4H7O2	4.51	0.48	4	7	0	90	CH4N3O2	2.37	0.42	1	4	3
87	C4H9NO	4.89	0.3	4	9	1	90	CH6N4O	2.74	0.23	1	6	4
87	C4H11N2	5.26	0.11	4	11	2	90	C2H2O4	2.35	0.82	2	2	0
87	C5H11O	5.62	0.33	5	11	0	90	C2H4NO3	2.72	0.63	2	4	1
87	C5H13N	5.99	0.15	5	13	1	90	C2H6N2O2	3.1	0.44	2	6	2
87	C6HN	6.88	0.2	6	1	1	90	C2H8N3O	3.47	0.25	2	8	3
87	C7H3	7.61	0.25	7	3	0	90	C2H10N4	3.85	0.06	2	10	4
							90	C3H6O3	3.46	0.64	3	6	0
88	N4O2	1.6	0.41	0	0	4	90	C3H8NO2	3.83	0.46	3	8	1
88	CN2O3	1.96	0.61	1	2	0	90	C3H10N2O	4.2	0.27	3	10	2
88	CH2N3O2	2.34	0.42	1	2	3	90	C4H10O2	4.56	0.48	4	10	0
88	CH4N4O	2.71	0.23	1	4	4	90	C4O3	5.47	0.12	4	0	0
88	C2O4	2.32	0.82	2	0	0	90	C5NO	5.82	0.34	5	0	1
88	C2H2NO3	2.69	0.63	2	2	1	90	C5H2N2	6.2	0.16	5	2	2
88	C2H4N2O2	3.07	0.43	2	4	2	90	C6H2O	6.55	0.38	6	2	0
88	C2H6N3O	3.44	0.25	2	6	3	90	C6H4N	6.93	0.2	6	4	1
88	C2H8N4	3.82	0.06	2	8	4	90	C7H6	7.66	0.25	7	6	0
88	C3H4O3	3.42	0.64	3	4	0							
88	C3H6NO2	3.8	0.45	3	6	1	91	HN3O3	1.28	0.61	0	1	3
88	C3H8N2O	4.17	0.27	3	8	2	91	H3N4O2	1.65	0.41	0	3	4
88	C3H10N3	4.55	0.08	3	10	3	91	CHNO4	1.63	0.81	1	1	1
88	C4H8O2	4.53	0.48	4	8	0	91	CH3N2O3	2.01	0.61	1	3	2
88	C4H10NO	4.9	0.3	4	10	1	91	CH5N3O2	2.38	0.42	1	5	3
88	C4H12N2	5.28	0.11	4	12	2	91	CH7N4O	2.76	0.23	1	7	4
88	C5H12O	5.63	0.33	5	12	0	91	C2H3O4	2.37	0.82	2	3	0
88	C5N2	6.17	0.16	5	0	2	91	C2H5NO3	2.74	0.63	2	5	1
88	C6O	6.52	0.38	0	0	0	91	C2H7N2O2	3.11	0.44	2	7	2
88	C6H2N	6.9	0.2	6	2	1	91	C2H9N3O	3.49	0.25	2	9	3
88	C7H4	7.63	0.25	7	4	0	91	C3H7O3	3.47	0.64	3	7	0

91	C3H9NO2	3.85	0.46	3	9	1	94	C3H2N4	4.8	0.09	3	2	4
91	C4HN3	5.48	0.12	4	1	3	94	C4NO2	4.78	0.49	4	0	1
91	C5HNO	5.84	0.34	5	1	1	94	C4H2N2O	5.16	0.31	4	2	2
91	C5H3N2	6.21	0.16	5	3	2	94	C4H4N3	5.53	0.13	4	4	3
91	C6H3O	6.57	0.38	6	3	0	94	C5H2O2	5.51	0.52	5	2	0
91	C6H5N	6.95	0.21	6	5	1	94	C5H4NO	5.89	0.34	5	4	1
91	C7H7	7.68	0.25	7	7	0	94	C5H6N2	6.26	0.17	5	6	2
							94	C6H6O	6.62	0.38	6	6	0
92	N2O4	0.92	0.8	0	0	2	94	C6H8N	6.99	0.21	6	8	1
92	H2N3O3	1.21	0.61	0	2	3	94	C7H10	7.72	0.26	7	10	0
92	H4N4O2	1.67	0.41	0	4	4							
92	CH2NO4	1.65	0.81	1	2	1	95	H3N2O4	0.97	0.81	0	3	2
92	CH4N2O3	2.02	0.61	1	4	2	95	H5N3O3	1.34	0.61	0	5	3
92	CH6N3O2	2.4	0.42	1	6	3	95	CH5NO4	1.7	0.81	1	5	1
92	CH8N4O	2.76	0.23	1	8	4	95	C3HN3O	4.44	0.28	1	3	1
92	C2H4O4	2.38	0.82	2	4	0	95	C3H3N4	4.82	0.1	3	3	4
92	C2H6NO3	2.76	0.63	2	6	1	95	C4HNO2	4.8	0.49	4	1	1
92	C2H8N2O2	3.13	0.44	2	8	2	95	C4H3N2O	5.17	0.31	4	3	2
92	C3H8O3	3.49	0.64	3	8	0	95	C4H5N3	5.55	0.13	4	5	3
92	C3N4	4.77	0.09	3	0	4	95	C5H3O2	5.53	0.52	5	3	0
92	C4N2O	5.12	0.31	4	0	2	95	C5H5NO	5.9	0.34	5	5	1
92	C4H2N3	5.5	0.13	4	2	3	95	C5H7N2	6.28	0.17	5	7	2
92	C5O2	5.48	0.52	5	0	0	95	C6H7O	6.63	0.39	6	7	0
92	C5H2NO	5.86	0.34	5	2	1	95	C6H9N	7.01	0.21	6	9	1
92	C5H4N2	6.23	0.16	5	4	2	95	C7H11	7.74	0.26	7	11	0
92	C6H4O	6.59	0.38	6	4	0							
92	C6H6N	6.96	0.21	6	6	1	96	H4N2O4	0.98	0.81	0	4	2
92	C7H8	7.69	0.25	7	8	0	96	C2N4O	3.73	0.26	2	0	4
							96	C3N2O2	4.08	0.47	3	0	2
93	HN2O4	0.94	0.8	0	1	2	96	C3H2N3O	4.46	0.28	3	2	3
93	H3N3O3	1.31	0.61	0	3	3	96	C3H4N4	4.83	0.1	3	4	4
93	H5N4O2	1.68	0.41	0	5	4	96	C4O3	4.44	0.6	4	0	0
93	CH3NO4	1.67	0.81	1	3	1	96	C4H2NO2	4.81	0.49	4	2	1
93	CH5N2O3	2.04	0.61	1	5	2	96	C4H4N2O	5.19	0.31	4	4	2
93	CH7N3O2	2.42	0.42	1	7	3	96	C4H6N3	5.56	0.13	4	6	3
93	C2H5O4	2.4	0.82	2	5	0	96	C5H4O2	5.55	0.53	5	4	0
93	C2H7NO3	2.77	0.63	2	7	1	96	C5H6NO	5.92	0.35	5	6	1
93	C3HN4	4.78	0.9	3	1	4	96	C5H8N2	6.29	0.17	5	8	2
93	C4HN2O	5.14	0.31	4	1	2	96	C6H8O	6.65	0.39	6	8	0
93	C4H3N3	5.51	0.13	4	3	3	96	C6H10N	7.03	0.21	6	10	1
93	C5HO2	5.5	0.52	5	1	0	96	C7H12	7.76	0.26	7	12	0
93	C5H3NO	5.87	0.34	5	3	1	96	C8	8.64	0.33	8	0	0
93	C5H5N2	6.25	0.16	5	5	2							
93	C6H5O	6.6	0.38	6	5	0	97	C2HN4O	3.74	0.26	2	1	4
93	C6H7N	6.98	0.21	6	7	1	97	C3HN2O2	4.1	0.47	3	1	2
93	C7H9	7.71	0.26	7	9	0	97	C3H3N3O	4.47	0.28	3	3	3
							97	C3H5N4	4.85	0.1	3	5	4
94	H2N2O4	0.95	0.8	0	2	2	97	C4HO3	4.46	0.68	4	1	0
94	H4N3O3	1.33	0.61	0	4	3	97	C4H3NO2	4.83	0.49	4	3	1
94	H6N4O2	1.7	0.41	0	6	4	97	C4H5N2O	5.2	0.31	4	5	2
94	CH4NO4	1.68	0.81	1	4	1	97	C4H7N3	5.58	0.13	4	7	3
94	CH6N2O3	2.06	0.62	1	6	2	97	C5H5O2	5.56	0.53	5	5	0
94	C2H6O4	2.41	0.82	2	6	0	97	C5H7NO	5.94	0.35	5	7	1
94	C3N3O	4.43	0.28	3	0	3	97	C5H9N2	6.31	0.17	5	9	2

97	C6H9O	6.67	0.39	6	9	0	100	C4H8N2O	5.25	0.31	4	8	2
97	C6H11N	7.04	0.21	6	11	1	100	C4H10N3	5.63	0.13	4	10	3
97	C7H13	7.77	0.26	7	13	0	100	C5H8O2	5.61	0.53	5	8	0
97	C8H	0.66	0.33	8	1	0	100	C5H10NO	5.98	0.35	5	10	1
							100	C5H12N2	6.36	0.17	5	12	2
98	C2N3O2	3.38	0.44	2	3	0	100	C6H2O	6.71	0.39	6	2	0
98	C2H2N4O	3.76	0.26	2	2	4	100	C6H14N	7.09	0.22	6	14	1
98	C3NO3	3.74	0.65	3	0	3	100	C6N2	7.25	0.23	6	2	0
98	C3H2N2O2	4.11	0.47	3	2	2	100	C7H16	7.82	0.26	7	1	0
98	C3H4N3O	4.49	0.28	3	4	3	100	C7O	7.6	0.45	7	0	0
98	C3H6N4	4.86	0.1	3	6	4	100	C7H2N	7.92	0.28	7	2	1
98	C4H2O3	4.47	0.68	3	2	0	100	C8H4	8.71	0.33	8	4	0
98	C4H4NO2	4.85	0.49	4	4	1							
98	C4H6N2O	5.22	0.31	4	6	2	101	CHN4O2	2.7	0.43	1	1	4
98	C4H8N3	5.59	0.13	4	8	3	101	C2HN2O3	3.06	0.64	2	1	2
98	C5H6O2	5.58	0.53	5	6	0	101	C2H3N3O2	3.43	0.45	2	3	3
98	C5H8NO	5.95	0.35	5	8	1	101	C2H5N4O	3.81	0.26	2	5	4
98	C5H10N2	6.33	0.17	5	10	2	101	C3HO4	3.41	0.84	3	1	0
98	C6H10O	6.68	0.39	6	10	0	101	C3H3NO3	3.79	0.65	3	3	1
98	C6H12N	7.06	0.21	6	12	1	101	C3H5N2O2	4.16	0.47	3	5	2
98	C7H14	7.79	0.26	7	14	0	101	C3H7N3O	4.54	0.28	3	7	3
98	C7N	7.95	0.27	7	0	1	101	C3H9N4	4.91	0.1	3	9	4
98	C8H2	8.68	0.33	8	2	0	101	C4H5O3	4.52	0.68	4	5	0
							101	C4H7NO2	4.89	0.5	4	7	1
99	C2HN3O2	3.4	0.44	2	1	3	101	C4H9N2O	5.27	0.31	4	9	2
99	C2H3N4O	3.77	0.26	2	3	4	101	C4HON3	5.64	0.13	4	1	3
99	C3HNO3	3.76	0.65	3	1	1	101	C5H9O2	5.63	0.53	5	9	0
99	C3H3N2O2	4.13	0.47	3	3	2	101	C5H11NO	6	0.35	5	11	1
99	C3H5N3O	4.51	0.28	3	5	1	101	C5H13N2	6.37	0.17	5	13	2
99	C3H7N4	4.88	0.1	3	5	3	101	C6H13O	6.73	0.39	6	13	0
99	C4H3O3	4.49	0.68	4	3	0	101	C6H15N	7.11	0.22	6	15	1
99	C4H5NO2	4.86	0.5	4	5	1	101	C6HN2	7.26	0.23	6	1	2
99	C4H7N2O	5.24	0.31	4	7	2	101	C7HO	7.62	0.45	7	1	0
99	C4H9N3	5.61	0.13	4	9	3	101	C7H3N	7.99	0.28	7	3	1
99	C5H7O2	5.59	0.53	5	7	0	101	C8H5	8.72	0.33	8	5	0
99	C5H9NO	5.97	0.35	5	9	1							
99	C5H11N2	6.34	0.17	5	11	2	102	CN3O3	2.34	0.62	1	3	0
99	C6H11O	6.7	0.39	6	11	0	102	CH2N4O2	2.72	0.43	1	2	4
99	C6H13N	7.07	0.21	6	13	1	102	C2NO4	2.7	0.83	2	0	1
99	C7H15	7.8	0.26	7	15	0	102	C2H2N2O3	3.07	0.64	2	2	2
99	C7HN	7.96	0.28	7	1	1	102	C2H4N3O2	3.45	0.45	2	4	3
99	C8H3	8.69	0.33	8	3	0	102	C2H6N4O	3.82	0.26	2	6	4
							102	C3H2O4	3.43	0.84	3	2	0
100	CN4O2	2.68	0.43	1	4	0	102	C3H4NO3	3.8	0.66	3	4	1
100	C2N2O3	3.04	0.63	2	2	0	102	C3H6N2O2	4.18	0.47	3	6	2
100	C2H2N3O2	3.42	0.45	2	2	3	102	C3H8N3O	4.55	0.28	3	8	3
100	C2H4N4O	3.79	0.26	2	4	4	102	C3H10N4	4.93	0.1	3	10	4
100	C3O4	3.4	0.84	3	0	0	102	C4H6O3	4.54	0.68	4	6	0
100	C3H2NO3	3.77	0.65	3	2	1	102	C4H8NO2	4.91	0.5	4	8	1
100	C3H4N2O2	4.15	0.47	3	4	2	102	C4H10N2O	5.28	0.32	4	10	2
100	C3H6N3O	4.52	0.28	3	6	3	102	C4H12N3	5.66	0.13	4	12	3
100	C3H8N4	4.9	0.1	3	8	4	102	C5H10O2	5.64	0.53	5	10	0
100	C4H4O3	4.5	0.68	4	4	0	102	C5H12NO	6.02	0.35	5	12	1
100	C4H6NO2	4.82	0.5	4	6	1	102	C5H14N2	0.39	0.17	5	14	2



102	C5N3	0.55	0.18	5	0	3	104	C7H4O	7.67	0.45	7	4	0
102	C6H14O	6.75	0.39	6	14	0	104	C7H6N	8.04	0.28	7	6	1
102	C6NO	6.9	0.4	6	0	1	104	C8H6	8.77	0.34	8	6	0
102	C6H2N2	7.28	0.23	6	2	2							
102	C7H2O	7.64	0.45	7	2	0	105	CHN2O4	2.02	0.81	1	1	2
102	C7H4N	8.01	0.28	7	4	1	105	CH3N3O3	2.39	0.62	1	3	3
102	C8H6	8.74	0.34	8	6	0	105	CH5N4O2	2.76	0.43	1	5	4
							105	C2H3NO4	2.75	0.83	2	3	1
103	CHN3O3	2.36	0.62	1	1	3	105	C2H5N2O3	3.12	0.64	2	5	2
103	CH3N4O2	2.73	0.43	1	3	4	105	C2H7N3O2	3.5	0.45	2	7	3
103	C2HNO4	2.72	0.82	2	1	1	105	C2H9N4O	3.87	0.26	2	9	4
103	C2H3N3O3	3.09	0.64	2	3	3	105	C3H5O4	3.48	0.84	3	5	0
103	C2H5N8O2	3.46	0.45	2	5	8	105	C3H7NO3	3.85	0.66	3	7	1
103	C2H7N4O	3.84	0.26	2	7	4	105	C3H9N2O2	4.23	0.47	3	9	2
103	C3H3O4	3.45	0.84	3	3	0	105	C3H11N3O	4.6	0.29	3	11	3
103	C3H5NO3	3.82	0.66	3	5	1	105	C4H9O3	4.58	0.62	4	9	0
103	C3H7N2O2	4.19	0.47	3	7	2	105	C4H11NO2	4.96	0.5	4	11	1
103	C3H9N3O	4.57	0.29	3	9	3	105	C4HN4	5.86	0.15	4	1	4
103	C3HON4	4.94	0.1	3	1	4	105	C5HN2O	6.22	0.36	5	1	2
103	C4H7O3	4.55	0.68	4	7	0	105	C5H3N3	6.6	0.19	5	3	3
103	C4H9NO2	4.93	0.5	4	9	1	105	C6HO2	6.58	0.58	6	1	0
103	C4H11N2O	5.3	0.32	4	11	2	105	C6H3NO	6.95	0.41	6	3	1
103	C4H13N3	5.67	0.14	4	13	3	105	C6H5N2	7.33	0.23	6	5	2
103	C5H11O2	5.66	0.53	5	11	0	105	C7H5O	7.68	0.45	7	5	0
103	C5H13NO	6.03	0.35	5	13	1	105	C7H7N	8.06	0.28	7	7	1
103	C5HN3	6.56	0.18	5	1	3	105	C8H9	8.79	0.34	8	9	0
103	C6HNO	6.92	0.4	6	1	1							
103	C6H3N2	7.29	0.23	6	3	2	106	CH2N2O4	2.03	0.82	1	2	2
103	C7H3O	7.65	0.45	7	3	0	106	CH4N3O3	2.41	0.62	1	4	3
103	C7H5N	8.03	0.28	7	5	1	106	CH6N4O2	2.78	0.43	1	6	4
103	C8H7	8.76	0.34	8	7	0	106	C2H4NO4	2.76	0.83	2	4	1
							106	C2H6N2O3	3.14	0.64	2	6	2
104	CN2O4	2	0.81	1	0	2	106	C2H8N3O2	3.51	0.45	2	8	3
104	CH2N3O3	2.37	0.62	1	2	3	106	C2H10N4O	3.89	0.26	2	10	4
104	CH4N4O2	2.75	0.43	1	4	4	106	C3H6O4	3.49	0.85	3	6	0
104	C2H2NO4	2.73	0.83	2	2	1	106	C3H8NO3	3.87	0.66	3	8	1
104	C2H1N2O3	3.11	0.64	2	1	2	106	C3H10N2O2	4.24	0.47	3	10	2
104	C2H6N3O2	3.48	0.45	2	6	3	106	C4H10O3	4.6	0.68	4	10	0
104	C2H8N4O	3.85	0.26	2	8	4	106	C4N3O	5.51	0.33	4	3	0
104	C3H4O4	3.46	0.84	3	4	0	106	C4H2N4	5.88	0.15	4	2	4
104	C3H6NO3	3.84	0.66	3	6	1	106	C5NO2	5.86	0.54	5	0	1
104	C3H8N2O2	4.21	0.47	3	8	2	106	C5H2N2O	6.24	0.36	5	2	2
104	C3H10N3O	4.59	0.29	3	10	3	106	C5H4N3	6.61	0.19	5	4	3
104	C3H12N4	4.96	0.1	3	12	4	106	C6H2O2	6.59	0.58	6	2	0
104	C4H8O3	4.57	0.68	4	8	0	106	C6H4NO	6.97	0.41	6	4	1
104	C4H10NO2	4.94	0.5	4	10	1	106	C6H6N2	7.34	0.23	6	6	2
104	C4H12N2O	5.32	0.32	4	12	2	106	C7H6O	7.7	0.46	7	6	0
104	C4N4	5.85	0.14	4	0	4	106	C7H8N	8.07	0.28	7	8	1
104	C5H12O2	5.67	0.53	5	12	0	106	C8H10	8.8	0.34	8	10	0
104	C5N2O	6.2	0.36	5	0	2							
104	C5H2N3	6.58	0.19	5	2	3	107	CH3N2O4	2.05	0.82	1	3	2
104	C6O2	6.56	0.58	6	0	0	107	CH5N3O3	2.42	0.62	1	5	3
104	C6H2NO	6.94	0.41	6	2	1	107	CH7N4O2	2.8	0.43	1	7	4
104	C6H4N2	7.31	0.23	6	4	2	107	C2H5NO4	2.78	0.83	2	5	1

107	C2H7N2O3	3.15	0.64	2	7	2	109	C8H13	8.85	0.35	8	13	0
107	C2H9N3O2	3.53	0.45	2	9	3	109	C9H	9.74	0.42	9	1	0
107	C3H7O4	3.51	0.85	3	7	0							
107	C3H9NO3	3.88	0.66	3	9	1	110	CH6N2O4	2.1	0.82	1	6	2
107	C4HN3O	5.52	0.33	4	1	3	110	C3N3O2	4.46	0.48	3	3	0
107	C4H3N4	5.9	0.15	4	3	4	110	C3H2N4O	4.84	0.3	3	2	4
107	C5HNO2	5.88	0.54	5	1	1	110	C4NO3	4.82	0.69	4	0	1
107	C5H3N2O	6.25	0.37	5	3	2	110	C4H2N2O2	5.2	0.51	4	2	2
107	C5H5N3	6.63	0.19	5	5	3	110	C4H4N3O	5.57	0.33	4	4	3
107	C6H3O2	6.61	0.58	6	3	0	110	C4H6N4	5.94	0.15	4	6	4
107	C6H5NO	6.98	0.41	6	5	1	110	C5H2O3	5.55	0.73	5	2	0
107	C6H7N2	7.36	0.23	6	7	2	110	C5H4NO2	5.93	0.55	5	4	1
107	C7H7O	7.72	0.46	7	7	0	110	C5H6N2O	6.3	0.37	5	6	2
107	C7H9N	8.09	0.29	7	9	1	110	C5H8N3	6.68	0.19	5	8	3
107	C8H11	8.82	0.34	8	11	0	110	C6H6O2	6.66	0.59	6	6	0
							110	C6H8NO	7.03	0.41	6	8	1
108	CH4N2O4	2.06	0.82	1	4	2	110	C6H10N2	7.41	0.24	6	10	2
108	CH6N3O3	2.44	0.62	1	6	3	110	C7H10O	7.76	0.46	7	10	0
108	CH6N4O2	2.81	0.43	1	6	4	110	C7H12N	8.14	0.29	7	12	1
108	C2H6NO4	2.8	0.83	2	6	1	110	C8H14	8.87	0.35	8	14	0
108	C2H6N2O3	3.17	0.64	2	6	2	110	C8N	9.03	0.36	8	0	1
108	C3H8O4	3.53	0.85	3	8	0	110	C9H2	9.76	0.42	9	2	0
108	C3N4O	4.81	0.3	3	4	0							
108	C4N2O2	5.16	0.51	4	0	2	111	C3HN3O2	4.48	0.48	3	1	3
108	C4H2N3O	5.54	0.33	4	2	3	111	C3H3N4O	4.85	0.3	3	3	4
108	C4H4N4	5.91	0.15	4	4	4	111	C4HNO3	4.84	0.69	4	1	1
108	C5O3	5.52	0.72	5	0	0	111	C4H3N2O2	5.21	0.51	4	3	2
108	C5H2NO2	5.89	0.54	5	2	1	111	C4H5N3O	5.59	0.33	4	5	3
108	C5H4N2O	6.27	0.37	5	4	2	111	C4H7N4	5.96	0.15	4	7	4
108	C5H6N3	6.64	0.19	5	6	3	111	C5H3O3	5.75	0.73	5	3	0
108	C6H4O2	6.63	0.59	6	4	0	111	C5H5NO2	5.94	0.55	5	5	1
108	C6H6NO	7	0.41	6	6	1	111	C5H7N2O	6.32	0.37	5	7	2
108	C6H8N2	7.37	0.24	6	8	2	111	C5H9N3	6.69	0.19	5	9	3
108	C7H8O	7.73	0.46	7	8	0	111	C6H7O2	6.67	0.59	6	7	0
108	C7H10N	8.11	0.29	7	10	1	111	C6H9NO	7.05	0.41	6	9	1
108	C8H12	8.84	0.34	8	12	0	111	C6H11N2	7.42	0.24	6	11	2
108	C9	9.73	0.42	9	0	0	111	C7H11O	7.78	0.46	7	11	0
							111	C7H13N	8.15	0.29	7	13	1
109	CH5N2O4	2.08	0.82	1	5	2	111	C8H15	8.88	0.35	8	15	0
109	CH7N3O3	2.45	0.62	1	7	3	111	C8HN	9.04	0.36	8	1	1
109	C2H7NO4	2.81	0.83	2	7	1	111	C9H3	9.77	0.43	9	3	0
109	C3HN4O	4.82	0.3	3	1	4							
109	C4HN2O2	5.18	0.51	4	1	2	112	C2N4O2	3.77	0.46	2	0	4
109	C4H3N3O	5.55	0.33	4	3	3	112	C3N2O3	4.12	0.67	3	0	2
109	C4H5N4	5.93	0.15	4	5	4	112	C3H2N3O2	4.5	0.48	3	2	3
109	C5HO3	5.54	0.73	5	1	0	112	C3H4N4O	4.87	0.3	3	4	4
109	C5H3NO2	5.91	0.55	5	3	1	112	C4O4	4.48	0.88	4	0	0
109	C5H5N2O	6.29	0.37	5	5	2	112	C4H2NO3	4.85	0.7	4	2	1
109	C5H7N3	6.66	0.19	5	7	3	112	C4H4N2O2	5.23	0.51	4	4	2
109	C6H5O2	6.64	0.59	6	5	0	112	C4H6N3O	5.6	0.33	4	6	3
109	C6H7NO	7.02	0.41	6	7	1	112	C4H8N4	5.98	0.15	4	8	4
109	C6H9N2	7.39	0.24	6	9	2	112	C5H4O3	5.58	0.73	5	4	0
109	C7H9O	7.75	0.46	7	9	0	112	C5H6NO2	5.96	0.55	5	6	1
109	C7H11N	8.12	0.29	7	11	1	112	C5H8N2O	6.33	0.37	5	8	2

112	C5H10N3	6.71	0.19	5	10	3	114	C6N3	7.63	0.25	6	0	3
112	C6H8O2	6.69	0.59	6	8	0	114	C7H14O	7.83	0.47	7	14	0
112	C6H10NO	7.06	0.41	6	10	1	114	C7H16N	8.2	0.29	7	16	1
112	C6H12N2	7.44	0.24	6	12	2	114	C7NO	7.98	0.48	7	0	1
112	C7H12O	7.8	0.46	7	12	0	114	C7H2N2	8.36	0.31	7	2	2
112	C7H14N	8.17	0.29	7	14	1	114	C8H18	8.93	0.35	8	18	0
112	C7N2	8.33	0.3	7	0	2	114	C8H2O	8.72	0.53	8	2	0
112	C8H16	8.9	0.35	8	16	0	114	C8H4N	9.09	0.37	8	4	1
112	C8O	8.68	0.53	8	0	0	114	C9H6	9.82	0.43	9	6	0
112	C8H2N	9.06	0.36	8	2	1							
112	C9H4	9.79	0.43	9	4	0	115	C2HN3O3	3.44	0.65	2	1	3
							115	C2H3N4O2	3.81	0.46	2	3	4
113	C2HN4O2	3.78	0.46	2	1	4	115	C3HNO3	3.8	0.86	3	1	1
113	C3HN2O3	4.14	0.67	3	1	2	115	C3H3N2O3	4.17	0.67	3	3	2
113	C3H3N3O2	4.51	0.48	3	3	3	115	C3H5N3O2	4.54	0.48	3	5	3
113	C3H5N4O	4.89	0.3	3	5	4	115	C3H7N4O	4.92	0.3	3	7	4
113	C4HO4	4.49	0.88	4	1	0	115	C4H3O4	4.53	0.88	4	3	0
113	C4H3NO3	4.87	0.7	4	3	1	115	C4H5NO3	4.9	0.7	4	5	1
113	C4H5N2O2	5.24	0.51	4	5	2	115	C4H7N2O2	5.28	0.52	4	7	2
113	C4H7N3O	5.62	0.33	4	7	3	115	C4H9N3O	5.65	0.33	4	9	3
113	C4H9N4	5.99	0.15	4	9	4	115	C4H11N4	6.02	0.16	4	11	4
113	C5H5O3	5.6	0.73	5	5	0	115	C5H7O3	5.63	0.73	5	7	0
113	C5H7NO2	5.97	0.55	5	7	1	115	C5H9NO2	6.01	0.55	5	9	1
113	C5H9N2O	6.35	0.37	5	9	2	115	C5H11N2O	6.38	0.37	5	11	2
113	C5H11N3	6.72	0.19	5	11	3	115	C5H13N3	6.76	0.2	5	13	3
113	C6H9O2	6.71	0.59	6	9	0	115	C6H11O2	6.74	0.59	6	11	0
113	C6H11NO	7.08	0.42	6	11	1	115	C6H13NO	7.11	0.42	6	13	1
113	C6H13N2	7.45	0.24	6	13	2	115	C6H15N2	7.49	0.24	6	15	2
113	C7H13O	7.81	0.46	7	13	0	115	C6HN3	7.64	0.25	6	1	3
113	C7H15N	8.19	0.29	7	15	1	115	C7H15O	7.84	0.47	7	15	0
113	C7HN2	8.34	0.31	7	1	2	115	C7H17N	8.22	0.3	7	17	1
113	C8H17	8.92	0.35	8	17	0	115	C7HNO	8	0.48	7	1	1
113	C8HO	8.7	0.53	8	1	0	115	C7H3N2	8.38	0.31	7	3	2
113	C8H3N	9.07	0.36	8	3	1	115	C8H3O	8.73	0.53	8	3	0
113	C9H5	9.81	0.43	9	5	0	115	C8H5N	9.11	0.37	8	5	1
							115	C9H7	9.84	0.43	9	7	0
114	C2N3O3	3.42	0.85	2	0	3							
114	C2H2N4O2	3.8	0.46	2	2	4	116	C2N2O4	3.08	0.84	2	0	2
114	C3NO4	3.78	0.86	3	0	1	116	C2H2N3O3	3.45	0.65	2	2	3
114	C3H2N2O3	4.15	0.67	3	2	2	116	C2H4N4O2	3.83	0.46	2	4	4
114	C3H4N3O2	4.53	0.48	3	4	3	116	C3H2NO4	3.81	0.86	3	2	1
114	C3H6N4O	4.9	0.3	3	6	4	116	C3H4N2O3	4.19	0.67	3	4	2
114	C4H2O4	4.51	0.88	4	2	0	116	C3H6N3O2	4.56	0.49	3	6	3
114	C4H4NO3	4.89	0.7	4	4	1	116	C3H8N4O	4.93	0.3	3	8	4
114	C4H6N2O2	5.26	0.51	4	6	2	116	C4H4O3	4.54	0.88	4	4	0
114	C4H8N3O	5.63	0.33	4	8	3	116	C4H6NO3	4.92	0.7	4	6	1
114	C4H10N4	6.01	0.15	4	10	4	116	C4H8N2O2	5.29	0.52	4	8	2
114	C5H6O3	5.62	0.73	5	6	0	116	C4H10N3O	5.67	0.34	4	10	3
114	C5H6NO2	5.99	0.55	5	6	1	116	C4H12N4	6.04	0.16	4	12	4
114	C5H10N2O	6.37	0.37	5	10	2	116	C5H8O3	5.65	0.73	5	8	0
114	C5H12N3	6.74	0.2	5	12	3	116	C5H10NO2	6.02	0.55	5	10	1
114	C6H10O2	6.72	0.59	6	10	0	116	C5H12N2O	6.4	0.37	5	12	2
114	C6H12NO	7.1	0.42	6	12	2	116	C5H14N3	6.77	0.2	5	14	3
114	C6H14N2	7.47	0.24	6	14	2	116	C5N4	6.93	0.21	5	0	4

116	C6H12O2	6.75	0.59	6	12	0	118	C5H12NO2	6.05	0.55	5	12	1
116	C6H14NO	7.13	0.42	6	14	1	118	C5H14N2O	6.43	0.38	5	14	2
116	C6H16N2	7.5	0.24	6	16	2	118	C5N3O	6.59	0.39	5	0	3
116	C6N2O	7.29	0.43	6	0	3	118	C5H2N4	6.96	0.21	5	2	4
116	C6H2N3	7.66	0.26	7	2	3	118	C6H14O2	6.79	0.6	6	14	0
116	C7H16O	7.86	0.47	7	16	0	118	C6NO2	6.94	0.61	6	0	1
116	C7O2	7.64	0.65	7	0	0	118	C6H2N2O	7.32	0.43	6	2	2
116	C7H2NO	8.02	0.48	7	2	1	118	C6H4N3	7.69	0.26	6	4	3
116	C7H4N2	8.39	0.31	7	4	2	118	C7H2O2	7.67	0.65	7	2	0
116	C8H4O	8.75	0.54	8	4	0	118	C7H4NO	8.05	0.48	7	4	1
116	C8H6N	9.12	0.37	8	6	1	118	C7H6N2	8.42	0.31	7	6	2
116	C9H8	9.85	0.43	9	8	0	118	C8H6O	8.78	0.54	8	6	0
	17						118	C8H8N	9.15	0.37	8	8	1
117	C2HN2O4	3.1	0.84	2	1	2	118	C9H10	9.89	0.44	9	10	0
117	C2H3N3O3	3.47	0.65	2	3	3							
117	C2H5N4O2	3.85	0.46	2	5	4	119	C2H3N2O4	3.13	0.84	2	3	2
117	C3H3NO4	3.83	0.86	3	3	1	119	C2H5N3O3	3.5	0.65	2	5	3
117	C3H5N2O8	4.2	0.67	3	5	2	119	C2H7N4O2	3.88	0.46	2	7	4
117	C3H7N3O2	4.52	0.49	3	7	3	119	C3H5NO4	3.86	0.86	3	5	1
117	C3H9N4O	4.95	0.3	3	9	4	119	C3H7N2O3	4.23	0.67	3	7	2
117	C4H5O4	4.96	0.88	4	5	0	119	C3H9N3O2	4.61	0.49	3	9	3
117	C4H7NO3	4.93	0.7	4	7	1	119	C3H11N4O	4.98	0.3	3	11	4
117	C4H9O2N2	5.31	0.52	4	9	2	119	C4H7O4	4.59	0.88	4	7	0
117	C4H11N3O	5.68	0.34	4	11	3	119	C4H9NO3	4.97	0.7	4	9	1
117	C4H13N4	6.06	0.16	4	13	4	119	C4H11N2O2	5.34	0.52	4	11	2
117	C5H9O3	5.66	0.73	5	9	0	119	C4H13N3O	5.71	0.34	4	13	3
117	C5H11NO2	6.04	0.55	5	11	1	119	C5H11O3	5.7	0.73	5	11	0
117	C5H13N2O	6.41	0.38	5	13	2	119	C5H13NO2	6.07	0.56	5	13	1
117	C5H15N3	6.79	0.2	5	15	3	119	C5HN3O	6.6	0.39	5	1	3
117	C5HN4	6.94	0.21	5	1	4	119	C5H3N4	6.98	0.21	5	3	4
117	C6H13O2	6.77	0.6	6	13	0	119	C6HNO2	6.96	0.61	6	1	
117	C6H15NO	7.14	0.42	6	15	1	119	C6H3N2O	7.33	0.43	6	3	2
117	C6HN2O	7.3	0.43	6	1	2	119	C6H5N3	7.71	0.26	6	5	3
117	C6H3N3	7.68	0.26	6	3	3	119	C7H3O2	7.69	0.66	7	3	0
117	C7HO2	7.66	0.65	7	1	0	119	C7H5NO	8.06	0.48	7	5	1
117	C7H3NO	8.03	0.48	7	3	1	119	C7H7N2	8.44	0.31	7	7	2
117	C7H5N2	8.41	0.31	7	5	2	119	C8H7O	8.8	0.54	8	7	0
117	C8H5O	8.76	0.54	8	5	0	119	C8H9N	9.17	0.37	8	9	0
117	C8H7N	9.14	0.37	8	7	1	119	C9H11	9.9	0.44	9	11	0
117	C9H9	9.87	0.43	9	9	0							
							120	C2H4N2O4	3.14	0.84	2	4	2
118	C2H2N2O4	3.11	0.84	2	2	2	120	C2H6N3O3	3.52	0.65	2	6	3
118	C2H4N3O3	3.49	0.65	2	4	3	120	C2H8N4O2	3.89	0.46	2	8	4
118	C2H6N4O2	3.86	0.46	2	6	4	120	C3H6NO4	3.88	0.86	3	6	1
118	C3H4NO4	3.84	0.86	3	4	1	120	C3H8N2O3	4.25	0.67	3	8	2
118	C3H6N2O3	4.22	0.67	3	6	2	120	C3H10N3O2	4.62	0.49	3	10	3
118	C3H8N3O2	4.59	0.49	3	8	3	120	C3H12N4O	5	0.3	3	12	4
118	C3H10N4O	4.97	0.3	3	10	4	120	C4H8O4	4.61	0.88	4	8	0
118	C4H6O4	4.57	0.88	4	6	1	120	C4H10NO3	4.98	0.7	4	10	1
118	C4H8NO3	4.95	0.7	4	8	1	120	C4H12N2O2	5.36	0.52	4	12	2
118	C4H10N2O2	5.32	0.52	4	10	2	120	C4N4O	5.89	0.35	4	0	4
118	C4H12N3O	5.7	0.34	4	12	3	120	C5H12O3	5.71	0.74	5	12	0
118	C4H14N4	6.07	0.16	4	14	4	120	C5N2O2	6.24	0.57	5	0	2
118	C5H10O3	5.68	0.73	5	10	0	120	C5H2N3O	6.62	0.39	5	2	3

120	C5H4N4	6.99	0.21	5	4	4	122	C7H8NO	8.11	0.49	7	8	1
120	C6O3	6.6	0.78	6	0	0	122	C7H10N2	8.49	0.32	7	10	2
120	C6H2NO2	6.98	0.61	6	2	1	122	C8H10O	8.84	0.54	8	10	0
120	C6H4N2O	7.35	0.43	6	4	2	122	C8H12N	9.22	0.38	8	12	1
120	C6H6N3	7.72	0.26	6	6	3	122	C9H14	9.95	0.44	9	14	0
120	C7H4O2	7.71	0.66	7	4	0	122	C9N	10.11	0.46	9	0	1
120	C7H6NO	0.08	0.49	7	6	1	122	C10H2	10.84	0.53	10	2	0
120	C7H8N2	8.46	0.32	7	8	2							
120	C8H8O	8.81	0.54	8	8	0	123	C2H7N2O4	3.19	0.84	2	7	2
120	C8H10N	9.19	0.37	8	10	1	123	C2H9N3O3	3.57	0.65	2	9	3
120	C9H12	9.92	0.44	9	12	0	123	C3H9NO4	3.92	0.86	3	9	1
120	C10	10.81	0.53	10	0	0	123	C4HN3O2	5.56	0.53	4	1	3
							123	C4H3N4O	5.94	0.35	4	3	4
121	C2H5N2O4	3.16	0.84	2	5	2	123	C5HNO3	5.92	0.75	5	1	1
121	C2H7N3O3	3.53	0.65	2	7	3	123	C5H3N2O2	6.29	0.57	5	3	2
121	C2H9N4O2	3.91	0.46	2	9	4	123	C5H5N3O	6.67	0.39	5	5	3
121	C3H7NO4	3.89	0.86	3	7	1	123	C5H7N4	7.04	0.22	5	7	4
121	C3H9N2O3	4.27	0.67	3	9	2	123	C6H3O3	6.65	0.79	6	3	0
121	C3H11N3O2	4.64	0.49	3	11	3	123	C6H5NO2	7.02	0.61	6	5	1
121	C4H9O4	4.62	0.89	4	9	0	123	C6H7N2O	7.4	0.44	6	7	2
121	C4H11NO3	5	0.7	4	11	1	123	C6H9N3	7.77	0.26	6	9	3
121	C4HN4O	5.9	0.35	4	1	4	123	C7H7O2	7.75	0.66	7	7	0
121	C5HN2O2	6.26	0.57	5	1	2	123	C7H9NO	8.13	0.49	7	9	1
121	C5H3N3O	6.63	0.39	5	3	3	123	C7H11N2	8.5	0.32	7	11	2
121	C5H5N4	7.01	0.21	5	5	4	123	C8H11O	8.86	0.55	8	11	0
121	C6HO3	6.62	0.79	6	1	0	123	C8H13N	9.23	0.38	8	13	1
121	C6H3NO2	6.99	0.61	6	3	1	123	C9H15	9.97	0.44	9	15	0
121	C6H5N2O	7.37	0.44	6	5	2	123	C9HN	10.12	0.46	9	1	1
121	C6H7N3	7.74	0.26	6	7	3	123	C10H3	10.85	0.53	10	3	0
121	C7H5O2	7.72	0.66	7	5	0							
121	C7H7NO	8.1	0.49	7	7	1	124	C2H8N2O4	3.21	0.84	2	8	2
121	C7H9N2	8.47	0.32	7	9	2	124	C3N4O2	4.85	0.5	3	0	4
121	C8H9O	8.83	0.54	8	9	0	124	C4N2O3	5.2	0.71	4	0	2
121	C8H11N	9.2	0.38	8	11	1	124	C4H2N3O2	5.58	0.53	4	2	3
121	C9H13	9.93	0.44	9	13	0	124	C4H4N4O	5.95	0.35	4	4	4
121	C10H	10.82	53	10	1	0	124	C5O4	5.56	0.93	5	0	0
							124	C5H2NO3	5.93	0.75	5	2	1
122	C2H6N2O4	3.18	0.84	2	6	2	124	C5H4N2O2	6.31	0.57	5	4	2
122	C2H8N3O3	3.55	0.65	2	8	3	124	C5H6N3O	6.68	0.39	5	6	3
122	C2H10N4O2	3.93	0.46	2	10	4	124	C5H8N4	7.06	0.22	5	8	4
122	C3H8NO4	3.91	0.86	3	8	1	124	C6H4O3	6.66	0.79	6	4	0
122	C3H10N2O3	4.28	0.67	3	10	2	124	C6H6NO2	7.04	0.61	6	6	1
122	C4H10O4	4.64	0.89	4	10	0	124	C6H8N2O	7.41	0.44	6	8	2
122	C4N3O2	5.54	0.53	4	0	3	124	C6H10N3	7.79	0.27	6	10	3
122	C4H2N4O	5.92	0.35	4	2	4	124	C7H8O2	7.77	0.66	7	8	0
122	C5NO3	5.9	0.75	5	0	1	124	C7H10NO	8.14	0.49	7	10	1
122	C5H2N2O2	6.28	0.57	5	2	2	124	C7H12N2	8.52	0.32	7	12	2
122	C5H4N3O	6.65	0.39	5	4	3	124	C8H12O	8.88	0.55	8	12	0
122	C5H6N4	7.02	0.21	5	6	4	124	C8H14N	9.25	0.38	8	14	1
122	C6H2O3	6.63	0.79	6	2	0	124	C8N2	9.41	0.39	8	0	0
122	C6H4NO2	7.01	0.61	6	4	1	124	C9H16	9.98	0.45	9	16	0
122	C6H6N2O	7.38	0.44	6	6	2	124	C9O	9.76	0.62	9	0	0
122	C6H8N3	7.76	0.26	6	8	3	124	C9H2N	10.14	0.46	9	2	1
122	C7H6O2	7.74	0.66	7	6	0	124	C10H4	10.87	0.53	10	4	0

125	C3HN4O2	4.86	0.5	3	1	4	127	C3H3N4O2	4.89	0.5	3	3	4
125	C4HN2O3	5.22	0.71	4	1	2	127	C4HNO4	4.88	0.9	4	1	1
125	C4H3N3O2	5.59	0.53	4	3	3	127	C4H3N2O3	5.25	0.71	4	3	2
125	C4H5N4O	5.97	0.35	4	5	4	127	C4H5N3O2	5.62	0.53	4	5	3
125	C5HO4	5.58	0.93	4	1	0	127	C4H7N4O	6	0.35	4	7	4
125	C5H3NO3	5.95	0.75	5	3	1	127	C5H3O4	5.61	0.93	5	3	0
125	C5H5N2O2	6.32	0.57	5	5	2	127	C5H5NO3	5.98	0.75	5	5	1
125	C5H7N3O	6.7	0.39	5	7	3	127	C5H7N2O2	6.36	0.57	5	7	2
125	C5H9N4	7.07	0.22	5	9	4	127	C5H9N3O	6.73	0.4	5	9	3
125	C6H5O3	6.68	0.79	6	5	0	127	C5H11N4	7.1	0.22	5	11	4
125	C6H7NO2	7.06	0.61	6	7	1	127	C6H7O3	6.71	0.79	6	7	0
125	C6H9N2O	7.43	0.44	6	9	2	127	C6H9NO2	7.09	0.62	6	9	1
125	C6H11N3	7.8	0.27	6	11	3	127	C6H11N2O	7.46	0.44	6	11	2
125	C7H9O2	7.79	0.66	7	9	0	127	C6H13N3	7.84	0.27	6	13	3
125	C7H11NO	8.16	0.49	7	11	1	127	C7H11O2	7.82	0.67	7	11	0
125	C7H13N2	8.54	0.32	7	13	2	127	C7H13NO	8.19	0.49	7	13	1
125	C8H13O	8.89	0.55	8	13	0	127	C7H15N2	8.57	0.32	7	15	2
125	C8H15N	9.27	0.38	8	15	1	127	C7HN3	8.72	0.34	7	1	3
125	C8HN2	9.42	0.4	8	1	2	127	C8H15O	8.92	0.55	8	15	0
125	C9H17	10	0.45	9	17	0	127	C8H17N	9.3	0.38	8	17	1
125	C9HO	9.78	0.63	9	1	0	127	C8HNO	9.08	0.57	8	1	1
125	C9H3N	10.15	0.46	9	3	1	127	C8H3N2	9.46	0.4	8	3	2
125	C10H5	10.89	0.53	10	5	0	127	C9H19	10.03	0.45	9	19	0
							127	C9H3O	9.81	0.63	9	3	0
							127	C9H5N	10.19	0.47	9	5	1
126	C3N3O3	4.5	0.68	3	0	3	127	C10H7	10.92	0.54	10	7	0
126	C3H2N4O2	4.88	0.5	3	2	4							
126	C4NO4	4.86	0.9	4	0	1	128	C3N2O4	4.16	0.87	3	0	2
126	C4H2N2O3	5.23	0.71	4	2	2	128	C3H2N3O3	4.54	0.68	3	2	3
126	C4H4N3O2	5.61	0.53	4	4	3	128	C3H4N4O2	4.91	0.5	3	4	4
126	C4H6N4O	5.98	0.35	4	6	4	128	C4H2NO4	4.89	0.9	4	2	1
126	C5H2O4	5.59	0.93	5	2	0	128	C4H4N2O3	5.27	0.72	4	4	2
126	C5H4NO3	5.97	0.75	5	4	1	128	C4H6N3O2	5.64	0.53	4	6	3
126	C5H6N2O2	6.34	0.57	5	6	2	128	C4H8N4O	6.02	0.36	4	8	4
126	C5H8N3O	6.71	0.39	5	8	3	128	C5H4O4	5.62	0.93	5	4	0
126	C5H10N4	7.09	0.22	5	10	4	128	C5H6NO3	6	0.75	5	6	1
126	C6H6O3	6.7	0.79	6	6	0	128	C5H8N2O2	6.37	0.57	5	8	2
126	C6H8NO2	7.07	0.62	6	8	1	128	C5H10N3O	6.75	0.4	5	10	3
126	C6H10N2O	7.45	0.44	6	10	2	128	C5H12N4	7.12	0.22	5	12	4
126	C6H12N3	7.82	0.27	6	12	3	128	C6H8O3	6.73	0.79	6	8	0
126	C7H10O2	7.8	0.66	7	10	0	128	C6H10NO2	7.1	0.62	6	10	1
126	C7H12NO	8.18	0.49	7	12	1	128	C6H12N2O	7.48	0.44	6	12	2
126	C7H14N2	8.55	0.32	7	14	2	128	C6H14N3	7.85	0.27	6	14	3
126	C7N3	8.71	0.34	7	0	3	128	C6N4	8.01	0.28	6	0	4
126	C8H14O	8.91	0.55	8	14	0	128	C7H12O2	7.83	0.67	7	12	0
126	C8H16N	9.28	0.38	8	16	1	128	C7H14NO	8.21	0.5	7	14	1
126	C8NO	9.07	0.56	8	0	1	128	C7H16N2	8.85	0.33	7	16	2
126	C8H2N2	9.44	0.4	8	2	2	128	C7N2O	8.37	0.51	7	0	2
126	C9H18	10.01	0.45	9	18	0	128	C7H2N3	8.74	0.34	7	2	3
126	C9H2O	9.8	0.63	9	2	0	128	C8H16O	8.94	0.55	8	16	0
126	C9H4N	10.17	0.46	9	4	1	128	C8O2	8.92	0.73	8	0	0
126	C10H6	10.9	0.54	10	6	0	128	C8H18N	9.31	0.39	8	18	1
							128	C8H2NO	9.1	0.57	8	2	1
127	C3HN3O3	4.52	0.68	3	1	3	128	C8H4N2	9.47	0.4	8	4	2

128	C9H20	10.05	0.45	9	20	0	130	C7H14O2	7.87	0.67	7	14	0
128	C9H4O	9.82	0.63	9	4	0	130	C7H16NO	8.24	0.5	7	16	1
128	C9H6N	10.2	0.47	9	6	1	130	C7NO2	8.02	0.68	7	0	1
128	C10H8	10.93	0.54	10	8	0	130	C7H18N2	8.62	0.33	7	18	2
							130	C7H2N2O	8.4	0.51	7	2	2
129	C3HN2O4	4.18	0.87	3	1	2	130	C7H4N3	8.77	0.34	7	4	3
129	C3H3N3O3	4.55	0.69	3	3	3	130	C8H18O	8.97	0.56	8	18	0
129	C3H5N4O2	4.93	0.5	3	5	4	130	C8H2O2	8.75	0.74	8	2	0
129	C4H3NO4	4.91	0.9	4	3	1	130	C8H4NO	9.13	0.57	8	4	1
129	C4H5N2O3	5.28	0.72	4	5	2	130	C8H6N2	9.5	0.4	8	6	2
129	C4H7N3O2	5.66	0.54	4	7	3	130	C9H6O	9.86	0.63	9	6	0
129	C4H9N4O	6.03	0.36	4	9	4	130	C9H8N	10.23	0.47	9	8	1
129	C5H5O4	5.64	0.93	5	5	0	130	C10H10	10.97	0.54	10	10	0
129	C5H7NO3	6.01	0.75	5	7	1							
129	C5H9N2O2	6.39	0.57	5	7	2	138	C3H10N2O4	4.32	0.88	3	10	2
129	C5H11N3O	6.76	0.4	5	11	3	138	C4N3O3	5.58	0.73	4	0	3
129	C5H13N4	7.14	0.22	5	13	4	138	C4H2N4O2	5.96	0.55	4	2	4
129	C6H9O3	6.74	0.79	6	9	0	138	C5NO4	5.94	0.95	5	0	1
129	C6H11NO2	7.12	0.62	6	11	1	138	C5H2N2O3	6.32	0.77	5	2	2
129	C6H12N2O	7.49	0.44	6	12	2	138	C5H4N3O2	6.69	0.59	5	4	3
129	C6H15N3	7.87	0.27	6	15	3	138	C5H6N4O	7.06	0.42	5	6	4
129	C6HN4	8.03	0.28	6	1	4	138	C6H2O4	6.67	0.99	6	2	0
129	C7H13O2	7.85	0.67	7	13	0	138	C6H4NO3	7.05	0.81	6	4	1
129	C7H15NO	8.22	0.5	7	15	1	138	C6H6N2O2	7.42	0.64	6	6	2
129	C7H17N2	8.6	0.33	7	17	2	138	C6H8N3O	8.8	0.47	6	8	3
129	C7HN2O	8.38	0.51	7	1	2	138	C6H10N4	8.17	0.3	6	10	4
129	C7H3N3	8.76	0.34	7	3	3	138	C7H6O3	7.78	0.86	7	6	0
129	C8H17O	8.96	0.55	8	17	0	138	C7H8NO2	8.15	0.69	7	8	1
129	C8HO2	8.74	0.74	8	1	0	138	C7H10N2O	8.53	0.52	7	10	2
129	C8H19N	9.33	0.39	8	19	1	138	C7H12N3	8.9	0.35	7	12	3
129	C8H3NO	9.11	0.57	8	3	1	138	C8H10O2	8.88	0.75	8	10	0
129	C8H5N2	9.49	0.4	8	5	2	138	C8H12NO	9.26	0.58	8	12	1
129	C9H5O	9.84	0.63	9	5	0	138	C8H14N2	9.63	0.42	8	14	2
129	C9H7N	10.22	0.47	9	7	1	138	C8N3	9.96	0.43	8	0	3
129	C10H9	10.95	0.54	10	9	0	138	C9H14O	9.99	0.65	9	14	0
							138	C9H16N	10.36	0.48	9	16	1
130	C3H2N2O4	4.19	0.87	3	2	2	138	C9NO	10.15	0.66	9	0	1
130	C3H4N3O3	4.57	0.69	3	4	3	138	C9H2N2	10.52	0.5	9	2	2
130	C3H6N4O2	4.94	0.5	3	6	4	138	C10H18	11.09	0.56	10	18	0
130	C4H4NO4	4.92	0.9	4	4	1	138	C10H2O	10.88	0.73	10	2	0
130	C4H6N2O3	5.3	0.72	4	6	2	138	C10H4N	11.25	0.57	10	4	1
130	C4H8N3O2	5.67	0.54	4	8	3	138	C11H6	11.98	0.65	11	6	0
130	C4H10N4O	6.05	0.36	4	10	4							
130	C5H6O4	5.66	0.73	5	6	0	139	C4HN3O3	5.6	0.73	4	1	3
130	C5H8NO3	6.03	0.75	5	8	1	139	C4H3N4O2	5.97	0.55	4	3	4
130	C5H10N2O2	6.4	0.58	5	10	2	139	C5HNO4	5.96	0.95	5	1	1
130	C5H12N3O	6.78	0.4	5	12	3	139	C5H3N2O3	6.33	0.77	5	3	2
130	C5H14N4	7.15	0.22	5	14	4	139	C5H5N3O2	6.71	0.59	5	5	3
130	C6H10O3	6.76	0.79	6	10	0	139	C5H7N4O	7.08	0.42	5	7	4
130	C6H12NO2	7.14	0.62	6	12	1	139	C6H3O4	6.69	0.99	6	3	0
130	C6H14N2O	7.51	0.45	6	14	2	139	C6H5NO3	7.06	0.82	6	5	1
130	C6H16N3	7.88	0.27	6	16	3	139	C6H7N2O2	7.44	0.64	6	7	2
130	C6N3O	7.67	0.46	6	0	3	139	C6H9N3O	7.81	0.47	6	9	3
130	C6H2N4	8.04	0.29	6	2	4	139	C6H11N4	8.19	0.3	6	11	4

139	C7H7O3	7.79	0.86	7	7	0	141	C5H7N3O2	6.74	0.6	5	7	3
139	C7H9NO2	8.17	0.69	7	9	1	141	C5H9N4O	7.11	0.42	5	9	4
139	C7H11N2O	8.54	0.52	7	11	2	141	C6H5O4	6.72	0.99	6	5	0
139	C7H13N3	8.92	0.35	7	13	3	141	C6H7NO3	7.09	0.82	6	7	1
139	C8H11O2	8.9	0.75	8	11	0	141	C6H9N2O2	7.47	0.64	6	9	2
139	C8H13NO	9.27	0.58	8	13	1	141	C6H11N3O	7.84	0.47	6	11	3
139	C8H15N2	9.65	0.42	8	15	2	141	C6H13N4	8.22	0.3	6	13	4
139	C8HN3	9.81	0.43	8	1	3	141	C7H9O3	7.83	0.87	7	9	0
139	C9H15O	10,00	0.65	9	15	0	141	C7H11NO2	8.2	0.7	7	11	1
139	C9H17N	10.38	0.49	9	17	1	141	C7H13N2O	8.57	0.53	7	13	2
139	C9HNO	10.16	0.66	9	1	1	141	C7H15N3	8.95	0.36	7	15	3
139	C9H3N2	10.54	0.5	9	3	2	141	C7HN4	9.11	0.37	7	1	4
139	C10H19	11.11	0.56	10	19	0	141	C8H13O2	8.93	0.75	8	13	0
139	C10H3O	10.89	0.74	10	3	0	141	C8H5NO	9.31	0.59	8	5	1
139	C10H5N	11.27	0.58	10	5	1	141	C8H17N2	9.68	0.42	8	17	2
139	C11H7	12,00	0.66	11	7	0	141	C8HN2O	9.46	0.6	8	1	2
							141	C8H3N3	9.84	0.43	8	3	3
140	C4N2O4	5.24	0.91	4	0	2	141	C9H17O	10.04	0.65	9	17	0
140	C4H2N3O3	5.62	0.73	4	2	3	141	C9HO2	9.82	0.83	9	1	0
140	C4H4N4O2	5.99	0.55	4	4	4	141	C9H19N	10.41	0.89	9	19	1
140	C5H2NO4	5.97	0.95	5	2	1	141	C9H3NO	10.19	0.67	9	3	1
140	C5H4N2O3	6.35	0.77	5	4	2	141	C9H5N2	10.57	0.5	9	5	2
140	C5H6N3O2	6.72	0.6	5	6	3	141	C10H21	11.14	0.56	10	21	0
140	C5H8N4O	7.1	0.42	5	8	4	141	C10H5O	10.93	0.74	10	5	0
140	C6H4O4	6.7	0.99	6	4	0	141	C10H7N	11.3	0.58	10	7	1
140	C6H6NO3	7.08	0.82	6	6	1	141	C11H9	12.03	0.66	11	9	0
140	C6H8N2O2	7.45	0.64	6	8	2							
140	C6H10N3O	7.83	0.44	6	10	3	142	C4H2N2O4	5.27	0.92	4	2	2
140	C6H12N4	8.2	0.3	6	12	4	142	C4H4N3O3	5.65	0.74	4	4	3
140	C7H8O3	7.81	0.87	7	8	0	142	C4H6N4O2	6.02	0.56	4	6	4
140	C7H10NO2	8.18	0.69	7	10	1	142	C5H4NO4	6,00	0.95	5	4	1
140	C7H12N2O	8.56	0.52	7	12	2	142	C5H6N2O3	6.38	0.77	5	6	2
140	C7H14N3	8.93	0.36	7	14	3	142	C5H8N3O2	6.95	0.6	5	8	3
140	C7N4	9.09	0.37	7	0	4	142	C5H10N4O	7.13	0.42	5	10	4
140	C8H12O2	8.92	0.75	8	12	0	142	C6H6O4	6.74	0.99	6	6	0
140	C8H14NO	9.29	0.58	8	14	1	142	C6H8NO3	7.11	0.82	6	8	1
140	C8H16ND	9.66	0.42	8	16	1	142	C6H10N2O2	7.48	0.64	6	10	2
140	C8N2O	9.45	0.6	8	0	2	142	C6H12N3O	7.86	0.47	6	12	3
140	C8H2N3	9.82	0.43	8	2	3	142	C6H14N4	8.23	0.3	6	14	4
140	C9H16O	10.02	0.65	9	16	0	142	C7H10O3	7.84	0.87	7	12	0
140	C9O2	9.8	0.83	9	0	0	142	C7H12NO2	8.22	0.7	7	12	1
140	C9H18N	10.39	0.49	9	18	1	142	C7H14N2O	8.59	0.53	7	14	2
140	C9H2NO	10.18	0.67	9	2	1	142	C7H16N3	8.96	0.36	7	16	3
140	C9H4N2	10.55	0.5	9	4	2	142	C7N3O	8.75	0.45	7	0	3
140	C10H20	11.13	0.56	10	20	0	142	C7H2N4	9.12	0.37	7	2	4
140	C10H4O	10.91	0.74	10	4	0	142	C8H14O2	8.95	0.75	8	14	0
140	C10H6N	10.28	0.58	10	6	1	142	C8H16NO	9.32	0.59	8	16	1
140	C11H8	12.01	0.66	11	8	0	142	C8NO2	9.1	0.77	8	0	1
							142	C8H18N2	9.7	0.42	8	18	2
141	C4HN2O4	5.26	0.92	4	1	2	142	C8N2O	9.48	0.6	8	0	2
141	C4H3N3O3	5.63	0.73	4	3	3	142	C8H4N3	9.85	0.44	8	4	3
141	C5H5N4O2	6.01	0.56	5	4	4	142	C9H18O	10.05	0.65	9	18	0
141	C5H3NO4	5.99	0.95	5	3	1	142	C9H2O2	9.44	0.83	9	0	2
141	C5H5N2O3	6.36	0.77	5	5	2	142	C9H20N	10.43	0.49	9	20	1



142	C9H4NO	10.21	0.67	9	4	1	144	C7H14NO	8.25	0.7	7	14	1
142	C9H6N2	10.58	0.51	9	6	2	144	C7H16N2O	8.62	0.53	7	16	2
142	C10H22	11.16	0.56	10	22	1	144	C7N2O2	8.41	0.711	7	0	2
142	C10H6O	10.94	0.74	10	6	0	144	C7H18N2	9,00	0.36	7	18	2
142	C10H8N	11.32	0.58	10	8	1	144	C7H2N3O	8.78	0.54	7	2	3
142	C11H10	12.05	0.66	11	10	0	144	C7H4N4	9.15	0.38	7	4	4
							144	C8H16O2	8.98	0.76	8	16	0
143	C4H3N2O4	5.29	0.92	4	3	2	144	C8O3	8.76	0.94	8	0	0
143	C4H5N3O3	5.66	0.74	4	5	3	144	C8H18NO	9.35	0.59	8	18	1
143	C4H7N4O2	6.04	0.56	4	7	4	144	C8H2NO2	9.14	0.77	8	2	1
143	C5H5NO4	6.02	0.95	5	5	1	144	C8H20N2	9.73	0.42	8	20	2
143	C5H7N2O3	6.4	0.78	5	7	2	144	C8H4N2O	9.51	0.6	8	4	2
143	C5H9N3O2	6.77	0.6	5	9	3	144	C8H6N3	9.89	0.44	8	6	3
143	C5H11N4O	7.14	0.42	5	11	4	144	C9H20O	10.08	0.66	9	20	0
143	C6H7O4	6.75	0.99	6	7	0	144	C9H4O2	9.87	0.84	9	4	0
143	C6H9NO3	7.13	0.82	6	9	1	144	C9H6NO	10.24	0.67	9	6	1
143	C6H11N2O2	7.5	0.65	6	11	2	144	C9H8N2	10.62	0.51	9	8	2
143	C6H13N3O	7.88	0.47	6	13	3	144	C10H8O	10.97	0.74	10	8	0
143	C6H15O4	8.25	0.3	6	15	0	144	C10H10N	11.35	0.58	10	10	1
143	C7H11O3	7.86	0.87	7	11	0	144	C11H12	12.08	0.67	11	12	0
143	C7H13NO2	8.23	0.7	7	13	1	144	C12	12.97	0.77	12	0	0
143	C7H15N2O	8.61	0.53	7	15	2							
143	C7H17N3	8.98	0.36	7	17	3	145	C4H5N2O4	5.32	0.92	4	5	2
143	C7HN3O	8.76	0.54	7	1	3	145	C4H7N3O3	5.7	0.74	4	7	3
143	C7H3N4	9.14	0.37	7	3	4	145	C4H9N4O2	6.07	0.56	4	9	4
143	C8H15O2	8.96	0.76	8	15	0	145	C5H7NO4	6.05	0.96	5	7	1
143	C8H17NO	9.34	0.59	8	17	1	145	C5H9N2O3	6.34	0.78	5	9	2
143	C8HNO2	9.12	0.77	8	1	1	145	C5H11N3O2	6.8	0.6	5	11	3
143	C8H19N2	9.71	0.42	8	19	2	145	C5H13N4O	7.18	0.43	5	13	4
143	C8H3N2O	9.49	0.6	8	3	2	145	C6H9O4	6.78	1,00	6	9	0
143	C8H5N3	9.87	0.44	8	5	3	145	C6H11N3O	7.16	0.82	6	11	3
143	C9H19O	10.07	0.65	9	19	0	145	C6H13N2O2	7.53	0.65	6	13	2
143	C9H3O2	9.85	0.83	9	3	0	145	C6H15N3O	7.91	0.48	6	15	3
143	C9H22N	10.44	0.49	9	22	1	145	C6H17N4	8.28	0.3	6	17	4
143	C9H5NO	10.23	0.67	9	5	1	145	C6HN4O	8.06	0.49	6	1	4
143	C9H7N2	10.6	0.51	9	7	2	145	C7H13O3	7.89	0.87	7	13	0
143	C10H7O	10.96	0.74	10	7	0	145	C7H15NO2	8.26	0.7	7	15	1
143	C10H9N	11.33	0.58	10	9	1	145	C7H17N2O	8.64	0.53	7	17	2
143	C11H11	12.06	0.66	11	11	0	145	C7HN2O2	8.42	0.71	7	1	2
							145	C7H19N3	9.01	0.36	7	19	3
144	C4H4N2O4	5.31	0.92	4	4	2	145	C7H3N3O	8.8	0.54	7	3	3
144	C4H6N3O3	5.68	0.74	4	6	3	145	C7H5N4	9.17	0.38	7	5	4
144	C4H8N4O2	6.05	0.56	4	8	4	145	C8H17O2	9,00	0.76	8	17	0
144	C5H6NO4	6.04	0.95	5	6	1	145	C8HO3	8.78	0.94	8	1	0
144	C5H8N2O3	6.41	0.78	5	8	2	145	C8H19NO	9.37	0.59	8	19	1
144	C5H10N3O2	6.79	0.6	5	10	3	145	C8H3NO2	9.15	0.77	8	3	1
144	C5H12N4O	7.16	0.42	5	12	4	145	C8H5N2O	9.53	0.61	8	5	2
144	C6H8O4	6.76	1,00	6	8	0	145	C8H7N3	9.9	0.44	8	7	3
144	C6H10NO3	7.14	0.82	6	10	1	145	C9H5O2	9.88	0.84	9	5	0
144	C6H12N2O2	7.52	0.65	6	12	2	145	C9H7NO	10.26	0.67	9	7	1
144	C6H14N3O	7.89	0.47	6	14	3	145	C9H9N2	10.63	0.51	9	9	2
144	C6H16N4	8.27	0.3	6	16	4	145	C10H9O	10.99	0.75	10	9	0
144	C6N4O	8.05	0.49	6	0	4	145	C10H11N	11.36	0.59	10	11	1
144	C7H12O3	7.87	0.87	7	12	0	145	C11H13	12.09	0.67	11	13	0

145	C12H	12.98	0.77	12	1	0	147	C7H5N3O	8.83	0.55	7	5	3
							147	C7H7N4	9.2	0.38	7	7	4
146	C4H6N2O4	5.34	0.92	4	6	2	147	C8H3O3	8.81	0.94	8	3	0
146	C4H8N3O3	5.7	0.74	4	8	3	147	C8H5NO2	9.18	0.78	8	5	1
146	C4H10N4O2	6.09	0.56	4	10	4	147	C8H7N2O	9.56	0.61	8	7	2
146	C5H8NO4	6.07	0.96	5	8	1	147	C8H9N3	9.93	0.44	8	9	3
146	C5H10N2O3	6.44	0.78	5	10	2	147	C9H7O2	9.92	0.84	9	7	0
146	C5H12N3O2	6.82	0.6	5	12	3	147	C9H9NO	10.29	0.68	9	9	1
146	C5H14N4O	7.19	0.43	5	14	4	147	C9H11N2	10.66	0.51	9	11	2
146	C6H10O4	6.8	1.00	6	10	0	147	C10H11O	11.02	0.75	10	11	0
146	C6H12NO3	7.17	0.82	6	12	1	147	C10H13N	11.4	0.59	10	13	1
146	C6H14N2O2	7.55	0.65	6	14	2	147	C11H15	12.13	0.67	11	15	0
146	C6H16N3O	7.92	0.48	6	16	3	147	C11HN	12.28	0.69	11	1	1
146	C6N3O2	7.71	0.66	6	0	3	147	C12H3	13.02	0.78	12	3	0
146	C6H18N4	8.3	0.33	6	18	4							
146	C6H2N4O	8.08	0.49	6	2	4	148	C4H8N2O4	5.37	0.92	4	8	2
146	C7H14O3	7.91	0.87	7	14	0	148	C4H10N3O3	5.74	0.74	4	10	3
146	C7H16NO2	8.28	0.7	7	16	1	148	C4H12N4O2	6.12	0.56	4	12	4
146	C7NO3	8.06	0.88	7	0	1	148	C5H10NO4	6.1	0.96	5	10	1
146	C7H18N2O	8.65	0.53	7	18	2	148	C5H12N2O3	6.48	0.78	5	12	2
146	C7H2N2O2	8.44	0.71	7	2	2	148	C5H14N3O2	6.85	0.6	5	14	3
146	C7H4N3O	8.81	0.55	7	4	3	148	C5H16N4O	7.22	0.43	5	16	4
146	C7H6N4	9.19	0.38	7	6	4	148	C5N4O2	7.01	0.61	5	0	4
146	C8H18O2	9.01	0.76	8	18	0	148	C6H12O4	6.83	1.00	6	12	0
146	C8H2O3	8.79	0.94	8	2	0	148	C6H14NO3	7.21	0.83	6	14	1
146	C8H4NO2	9.17	0.77	8	4	1	148	C6H16N2O2	7.58	0.85	6	16	2
146	C8H8N2O	9.54	0.61	8	8	2	148	C6N2O3	7.36	0.84	6	0	2
146	C8H10N3	9.92	0.44	8	10	3	148	C6H2N3O2	7.74	0.66	6	2	3
146	C9H6O2	9.9	0.84	9	6	0	148	C6H4N4O	8.11	0.49	6	4	4
146	C9H8NO	10.27	0.67	9	8	1	148	C7H16O3	7.94	0.88	7	16	0
146	C9H10N2	10.65	0.51	9	10	2	148	C7O4	7.72	1.06	7	0	0
146	C10H10O	11.01	0.75	10	10	0	148	C7H2NO3	8.09	0.89	7	2	1
146	C10H12N	11.38	0.59	10	12	1	148	C7H4N2O2	8.47	0.72	7	4	2
146	C11H14	12.11	0.67	11	14	0	148	C7H6N3O	8.84	0.55	7	6	3
146	C11N	12.27	0.69	11	0	1	148	C7H8N4	9.22	0.38	7	8	4
146	C12H2	13.00	0.77	12	2	0	148	C8H4O3	8.83	0.94	8	8	0
							148	C8H6NO2	9.2	0.78	8	6	1
147	C4H7N2O4	5.35	0.92	4	7	2	148	C8H8N2O	9.57	0.81	8	8	2
147	C4H9N3O3	5.73	0.74	4	9	3	148	C8H10N3	9.95	0.45	8	10	3
147	C4H11N4O2	6.1	0.56	4	11	4	148	C9H8O2	9.93	0.84	9	8	0
147	C5H9NO4	6.08	0.96	5	9	1	148	C9H10NO	10.31	0.68	9	10	1
147	C5H11N2O3	6.46	0.78	5	11	2	148	C9H12N2	10.68	0.52	9	12	2
147	C5H13N3O2	6.83	0.6	5	13	3	148	C10H12O	11.04	0.75	10	12	0
147	C5H15N4O	7.21	0.43	5	15	4	148	C10H14N	11.41	0.59	10	14	1
147	C6H11O4	6.82	1.00	6	11	0	148	C10N2	11.57	0.61	10	0	2
147	C6H13NO3	7.19	0.82	6	13	3	148	C11H16	12.14	0.67	11	16	0
147	C6H15N2O2	7.56	0.65	6	15	2	148	C11O	11.93	0.85	11	0	0
147	C6H17N3O	7.94	0.48	6	17	3	148	C11H2N	12.3	0.69	11	2	1
147	C6HN3O2	7.72	0.66	6	1	3	148	C12H4	13.03	0.78	12	4	0
147	C6H3N4O	8.1	0.49	6	1	3							
147	C7H15O3	7.92	0.87	7	15	0	149	C4H9N2O4	5.39	0.92	4	9	2
147	C7H17NO2	8.3	0.7	7	17	1	149	C4H11N3O3	5.76	0.74	4	11	3
147	C7HNO3	8.08	0.89	7	1	1	149	C4H13N4O2	6.13	0.56	4	13	4
147	C7H3N2O2	8.45	0.72	7	3	2	149	C5H11NO4	6.12	0.96	5	11	1

149	C5H13N2O3	6.49	0.78	5	13	2	150	C10H16N	11.44	0.6	10	16	1
149	C5H15N3O2	6.87	0.61	5	15	3	150	C10NO	11.23	0.77	10	0	1
149	C5HN4O2	7.02	0.62	5	1	4	150	C10H2N2	11.6	0.81	10	2	2
149	C6H13O4	6.85	1.00	6	13	0	150	C11H18	12.17	0.68	11	18	0
149	C6H15NO3	7.22	0.83	6	15	1	150	C11H2O	11.96	0.85	11	2	0
149	C6HN2O3	7.38	0.84	6	1	2	150	C11H4N	12.33	0.7	11	4	1
149	C6H3N3O2	7.75	0.66	6	3	3	150	C12H6	13.06	0.78	12	6	0
149	C6H5N4O	8.13	0.49	6	5	4							
149	C7HO4	7.74	1.06	7	1	0	151	C4H11N2O4	5.42	0.92	4	11	2
149	C7H3NO3	8.11	0.89	7	3	1	151	C4H13N3O3	5.79	0.74	4	13	3
149	C7H5N2O2	8.49	0.72	7	5	2	151	C5H13NO4	6.15	0.96	5	13	1
149	C7H7N3O	8.86	0.55	7	7	3	151	C5HN3O3	6.68	0.79	5	1	3
149	C7H9N4	9.23	0.38	7	9	4	151	C5H3N4O2	7.05	0.62	5	3	4
149	C8H5O3	8.84	0.95	8	5	0	151	C6HNO4	7.04	1.01	6	1	1
149	C8H7NO2	9.22	0.78	8	7	1	151	C6H3N2O3	7.41	0.84	6	3	2
149	C8H9N2O	9.59	0.81	8	9	2	151	C6H5N3O2	7.79	0.67	6	5	3
149	C8H11N3	9.97	0.45	8	11	2	151	C6H7N4O	8.16	0.5	6	7	4
149	C9H9O2	9.95	0.84	9	9	0	151	C7H3O4	7.77	1.06	7	3	0
149	C9H11NO	10.32	0.68	9	11	1	151	C7H5NO3	8.14	0.89	7	5	1
149	C9H13N2	10.7	0.52	9	13	2	151	C7H7N2O2	8.52	0.72	7	7	2
149	C10H13O	11.05	0.75	10	13	0	151	C7H9N3O	8.89	0.55	7	9	3
149	C10H15N	11.43	0.59	10	15	1	151	C7H11N4	9.27	0.39	7	11	4
149	C10HN2	11.58	0.81	10	1	2	151	C8H7O3	8.87	0.95	8	7	0
149	C11H17	12.16	0.67	11	17	0	151	C8H9NO2	9.25	0.78	8	9	1
149	C11HO	11.94	0.85	11	1	0	151	C8H11N2O	9.62	0.62	8	11	2
149	C11H3N	12.32	0.69	11	3	1	151	C8H13N3	10.00	0.45	8	13	3
149	C12H5	13.05	0.78	12	5	0	151	C9H11O2	9.98	0.85	9	11	0
							151	C9H13NO	10.35	0.68	9	13	1
150	C4H10N2O4	5.4	0.92	4	10	2	151	C9H15N2	10.73	0.52	9	15	2
150	C4H12N3O3	5.78	0.74	4	12	3	151	C9HN3	10.89	0.54	9	1	3
150	C4H14N4O2	6.15	0.56	4	14	4	151	C10H15O	11.09	0.76	10	15	0
150	C5H12NO4	6.13	0.96	5	12	1	151	C10H17N	11.46	0.6	10	17	1
150	C5H14N2O3	6.51	0.78	5	14	2	151	C10HNO	11.24	0.77	10	1	1
150	C5N3O3	6.66	0.79	5	0	3	151	C10H3N2	11.62	0.61	10	3	2
150	C5H2N4O2	7.04	0.62	5	2	4	151	C11H19	12.19	0.68	11	19	0
150	C6H14O4	6.86	1.00	6	14	0	151	C11H3O	11.97	0.85	11	3	0
150	C6NO4	7.02	1.01	6	0	1	151	C11H5N	12.35	0.7	11	5	1
150	C6H2N2O3	7.4	0.84	6	2	2	151	C12H7	13.08	0.79	12	7	0
150	C6H4N3O2	7.77	0.67	6	4	3							
150	C6H6N4O	8.14	0.49	6	6	4	152	C4H12N2O4	5.43	0.92	4	12	2
150	C7H2O4	7.75	1.06	7	2	0	152	C5N2O4	6.32	0.97	5	0	2
150	C7H4NO3	8.13	0.89	7	4	1	152	C5H2N3O3	6.7	0.79	5	2	3
150	C7H6N2O2	8.5	0.72	7	6	2	152	C5H4N4O2	7.07	0.62	5	4	4
150	C7H8N3O	8.88	0.55	7	8	3	152	C6H2NO4	7.05	1.01	6	2	1
150	C7H10N4	9.25	0.38	7	10	4	152	C6H4N2O3	7.43	0.84	6	4	2
150	C8H6O3	8.86	0.95	8	6	0	152	C6H6N3O2	7.8	0.67	6	6	3
150	C8H8NO2	9.23	0.78	8	8	1	152	C6H8N4O	8.18	0.5	6	8	4
150	C8H10N2O	9.61	0.61	8	10	2	152	C7H4O4	7.78	1.06	7	4	0
150	C8H12N3	9.98	0.45	8	12	3	152	C7H6NO3	8.16	0.89	7	6	1
150	C9H10O2	9.96	0.84	9	10	0	152	C7H8N2O2	8.53	0.72	7	6	2
150	C9H12NO	10.34	0.68	9	12	1	152	C7H10N3O	8.91	0.55	7	10	3
150	C9H14N2	10.71	0.52	9	14	2	152	C7H12N4	9.28	0.39	7	12	4
150	C9N3	10.87	0.54	9	0	3	152	C8H8O3	8.89	0.95	8	8	0
150	C10H14O	11.07	0.75	10	14	0	152	C8H10NO2	9.26	0.78	8	10	1

152	C8H12N2O	9.64	0.62	8	12	2	154	C6H6N2O3	7.46	0.84	6	6	2
152	C8H14N3	10.01	0.45	8	14	3	154	C6H8N3O2	7.83	0.67	6	8	3
152	C8N4	10.17	0.47	8	0	4	154	C6H10N4O	8.21	0.5	6	10	4
152	C9H12O2	10,00	0.85	9	12	0	154	C7H6O4	7.82	1.07	7	6	0
152	C9H14NO	10.37	0.68	9	14	1	154	C7H8NO3	8.19	0.9	7	8	1
152	C9H16N2	10.74	0.52	9	16	2	154	C7H10N2O2	8.57	0.73	7	10	2
152	C9N2O	10.53	0.7	9	0	2	154	C7H12N3O	8.94	0.56	7	12	3
152	C9H2N3	10.9	0.54	9	2	3	154	C7H14N4	9.31	0.39	7	14	4
152	C10H16O	11.1	0.76	10	16	0	154	C8H10O3	8.92	0.95	8	10	0
152	C10O2	10.88	0.93	10	0	0	154	C8H12NO2	9.3	0.79	8	12	1
152	C10H18N	111.48	0.6	10	18	1	154	C8H14N2O	9.67	0.62	8	14	2
152	C10H2NO	11.26	0.78	10	2	1	154	C8H16N3	10.05	0.46	8	16	3
152	C10H4N2	11.63	0.62	10	4	2	154	C8N3O	9.83	0.63	8	0	3
152	C11H20	12.21	0.68	11	20	0	154	C8H2N4	10.2	0.47	8	2	4
152	C11H4O	11.99	0.86	11	4	0	154	C9H14O2	10.03	0.85	9	14	0
152	C11H6N	12.36	0.7	11	6	1	154	C9H16NO	10.4	0.69	9	16	1
152	C12H8	13.1	0.79	12	8	0	154	C9NO2	10.19	0.87	9	0	1
							154	C9H18N2	10.78	0.53	9	18	2
153	C5HN2O4	6.34	0.97	5	1	2	154	C9H2N2O	10.56	0.7	9	2	2
153	C5H3N3O3	6.71	0.8	5	3	3	154	C9H4N3	10.93	0.54	9	4	3
153	C5H5N4O2	7.09	0.62	5	5	4	154	C10H18O	11.13	0.76	10	18	0
153	C6H3NO4	7.07	1.02	6	3	1	154	C10H2O2	10.92	0.94	10	2	0
153	C6H5N2O3	7.44	0.84	6	5	2	154	C10H20N	11.51	0.6	10	20	1
153	C6H7N3O2	7.82	0.67	6	7	3	154	C10H4NO	11.29	0.78	10	4	1
153	C6H9N4O	8.19	0.5	6	9	4	154	C10H6N2	11.66	0.62	10	6	2
153	C7H5O4	7.8	1.07	7	5	0	154	C11H22	12.24	0.68	11	22	0
153	C7H7NO3	8.17	0.89	7	7	1	154	C11H6O	12.02	0.86	11	6	0
153	C7H9N2O2	8.55	0.72	7	9	2	154	C11H8N	12.4	0.7	11	8	1
153	C7H11N3O	8.92	0.56	7	11	3	154	C12H10	13.13	0.79	12	10	0
153	C7H13N4	9.3	0.39	7	13	4							
153	C8H9O3	8.91	0.95	8	9	0	155	C5H3N2O4	6.37	0.97	5	3	2
153	C8H11NO2	9.28	0.78	8	11	1	155	C5H5N3O3	6.74	0.8	5	5	3
153	C8H13N2O	9.65	0.62	8	13	2	155	C5H7N4O2	7.12	0.62	5	7	4
153	C8H15N3	10.03	0.45	8	15	3	155	C6H5NO4	7.1	1.02	6	5	1
153	C8HN4	10.19	0.47	8	1	4	155	C6H7N2O3	7.48	0.84	6	7	2
153	C9H13O2	10.01	0.85	9	13	0	155	C6H9N3O2	7.85	0.67	6	9	3
153	C9H15NO	10.39	0.69	9	15	1	155	C6H11N4O	8.22	0.5	6	11	4
153	C9H17N2	10.76	0.52	9	17	2	155	C7H7O4	7.83	1.07	7	7	0
153	C9HN2O	10.54	0.7	9	1	2	155	C7H9NO3	8.21	0.9	7	9	1
153	C9H3N3	10.92	0.54	9	3	3	155	C7H11N2O2	8.58	0.73	7	11	2
153	C10H17O	11.12	0.76	10	17	0	155	C7H13N3O	8.96	0.56	7	13	3
153	C10HO2	10.9	0.94	10	1	0	155	C7H15N4	9.33	0.39	7	15	4
153	C10H19N	11.49	0.6	10	19	1	155	C8H11O3	8.94	0.95	8	11	0
153	C10H3NO	11.27	0.78	10	3	1	155	C8H13NO2	9.31	0.79	8	13	1
153	C10H5N2	11.65	0.62	10	5	2	155	C8H15N2O	9.69	0.62	8	15	2
153	C11H21	12.22	0.68	11	21	0	155	C8H17N3	10.06	0.46	8	17	3
153	C11H5O	12.01	0.86	11	5	0	155	C8HN3O	9.84	0.64	8	1	3
153	C11H7N	12.38	0.7	11	7	1	155	C8H3N4	10.22	0.74	8	3	4
153	C12H9	13.11	0.79				155	C9H15O2	10.04	0.85	9	15	0
							155	C9H17NO	10.42	0.96	9	17	1
154	C5H2N2O4	6.35	0.97	5	2	2	155	C9HNO2	10.2	0.87	9	1	1
154	C5H4N3O3	6.73	0.8	5	4	3	155	C9H19N2	10.79	0.53	9	19	2
154	C5H6N4O2	7.1	0.62	5	6	4	155	C9H3N2O	10.58	0.71	9	3	2
154	C6H4NO4	7.09	1.02	6	4	1	155	C9H5N3	10.95	0.54	9	5	3

155	C10H19O	11.15	0.76	10	19	0	157	C6H13N4O	8.26	0.5	6	13	4
155	C10H3O2	10.93	0.94	10	3	0	157	C7H9O4	7.86	1.07	7	9	0
155	C10H21N	11.52	0.6	10	21	1	157	C7H11NO3	8.24	0.9	7	11	1
155	C10H5NO	11.31	0.78	10	5	1	157	C7H13N2O2	8.61	0.73	7	13	2
155	C10H7N2	11.68	0.62	10	7	2	157	C7H15N3O	8.99	0.56	7	15	3
155	C11H23	12.25	0.69	11	23	0	157	C7H17N4	9.36	0.39	7	17	4
155	C11H7O	12.04	0.85	11	7	0	157	C7HN3O	9.15	0.57	7	1	3
155	C11H9N	12.41	0.71	11	9	1	157	C8H13O3	8.97	0.96	8	13	0
155	C12H11	13.14	0.79	12	11	0	157	C8H15NO2	9.34	0.79	8	15	1
							157	C8H17N2O	9.72	0.62	8	17	2
156	C5H4N2O4	6.39	0.98	5	4	2	157	C8HN2O2	9.5	0.8	8	1	2
156	C5H6N3O3	6.76	0.8	5	6	3	157	C8H19N3	10.09	0.46	8	19	3
156	C5H8N4O2	7.14	0.62	5	8	4	157	C8H3N3O	9.86	0.54	8	3	3
156	C6H6NO4	7.12	1.02	6	6	1	157	C8H5N4	10.25	0.48	8	5	4
156	C6H8N2O3	7.49	0.85	6	8	2	157	C9H17O2	10.08	0.86	9	17	0
156	C6H10N3O2	7.87	0.67	6	10	3	157	C9HO3	9.86	1.03	9	1	0
156	C6H12N4O	8.24	0.5	6	12	4	157	C9H19NO	10.45	0.69	9	19	1
156	C7H8O4	7.85	1.07	7	8	0	157	C9H3NO2	10.23	0.87	9	3	1
156	C7H10NO3	8.22	0.9	7	10	1	157	C9H21N2	10.82	0.63	9	21	2
156	C7H12N2O2	8.6	0.73	7	12	2	157	C9H5N2O	10.61	0.71	9	5	2
156	C7H14N3O	8.97	0.56	7	14	3	157	C9H7N3	10.98	0.55	9	7	3
156	C7H16N4	9.35	0.39	7	16	4	157	C10H21O	11.18	0.77	10	21	0
156	C7N4O	9.13	0.57	7	0	4	157	C10H5O2	10.96	0.94	10	5	0
156	C8H12O3	8.95	0.96	8	12	0	157	C10H23N	11.56	0.61	10	23	1
156	C8H14NO2	9.33	0.79	8	14	1	157	C10H7NO	11.34	0.78	10	7	1
156	C8H16N2O	9.7	0.62	8	16	2	157	C10H9N2	11.71	0.63	10	9	2
156	C8N2O2	9.49	0.8	8	0	2	157	C11H9O	12.07	0.86	11	9	0
156	C8H18N3	10.08	0.46	8	18	3	157	C11H11N	12.44	0.71	11	11	1
156	C8HH2N3O	9.86	0.64	8	2	3	157	C12H13	13.18	0.8	12	13	0
156	C8H4N4	10.23	0.47	8	4	4	157	C13H	14.06	0.91	13	1	0
156	C9H16O2	10.06	0.85	9	16	0							
156	C9O3	9.84	1.03	9	0	0	158	C5H6N2O4	6.42	0.98	5	6	2
156	C9H18NO	10.43	0.69	9	18	1	158	C5H6N3O3	6.79	0.8	5	8	3
156	C9H2NO2	10.22	0.87	9	2	1	158	C5H10N4O2	7.17	0.63	5	10	4
156	C9H20N2	10.81	0.53	9	20	2	158	C6H8NO4	7.15	1.02	6	8	1
156	C9H4N2O	10.59	0.71	9	4	2	158	C6H10N2O3	7.52	0.85	6	10	2
156	C9H6N3	10.97	0.55	9	6	3	158	C6H12N3O2	7.9	0.68	6	12	3
156	C10H20O	11.17	0.77	10	20	0	158	C8H14N4O	8.27	0.5	8	14	4
156	C10H4O2	10.95	0.94	10	4	0	158	C7H10O4	7.88	1.07	7	10	0
156	C10H22N	11.54	0.61	10	22	1	158	C7H12NO3	8.25	0.9	7	12	1
156	C10H6NO	11.32	0.78	10	6	1	158	C7H14N2O2	8.63	0.73	7	14	2
156	C10H8N2	11.7	62.00	10	8	2	158	C7H16N3O	9,00	0.56	7	16	3
156	C11H24	12.27	0.69	11	24	0	158	C7N3O2	8.79	0.74	7	0	3
156	C11H8O	12.05	0.86	11	8	0	158	C7H18N4	9.38	0.4	7	18	4
156	C11H10N	12.43	0.71	1	10	1	158	C7H2N4O	9.16	0.58	7	2	4
156	C12H12	13.16	0.8	12	12	0	158	C8H14O3	8.99	0.96	8	14	0
156	C13	14.05	0.91	13	0	0	158	C8H16NO2	9.36	0.79	8	16	1
							158	C8NO3	9.14	0.97	8	0	1
157	C5H5N2O4	6.4	0.98	5	5	2	158	C8H18N2	9.73	0.63	8	18	2
157	C5H7N3O3	6.78	0.8	5	7	3	158	C8H2N2O2	9.52	0.81	8	2	2
157	C5H9N4O2	7.15	0.62	5	9	4	158	C8H20N3	10.11	0.46	8	20	3
157	C6H7NO4	7.13	1.02	6	7	1	158	C8H4N3O	9.89	0.64	8	4	3
157	C6H9N2O3	7.51	0.95	6	9	2	158	C8H6N4	10.27	0.48	8	6	4
157	C6H11N3O2	7.88	0.67	6	11	3	158	C9H18O2	10.09	0.86	9	18	0

158	C9H2O3	9.87	1.04	9	2	0	160	C5H10N3O3	6.82	0.8	5	10	3
158	C9H20NO	10.47	0.69	9	20	1	160	C5H12N4O2	7.2	0.63	5	12	4
158	C9H4NO2	10.25	0.87	9	4	1	160	C6H10NO4	7.18	1.02	6	10	1
158	C9H23N2	10.84	0.53	9	23	2	160	C6H12N2O3	7.56	0.85	6	12	2
158	C9H6N2O	10.62	0.71	9	6	2	160	C6H14N3O2	7.93	0.68	6	14	3
158	C9H8N3	11,00	0.55	9	8	3	160	C6H16N4O	8.3	0.51	6	16	4
158	C10H22O	11.2	0.77	10	22	0	160	C6N4O2	8.09	0.69	6	0	4
158	C10H6O2	10.98	0.95	10	6	0	160	C7H12O4	7.91	1.07	7	12	0
158	C10H8NO	11.35	0.79	10	8	1	160	C7HH14NO3	8.29	0.9	7	14	1
158	C10H10N2	11.73	0.63	10	10	2	160	C7H16N2O2	8.66	0.73	7	6	2
158	C11H10O	11.09	0.87	11	10	0	160	C7N2O3	8.44	0.92	7	0	2
158	C11H12N	12.46	0.71	11	12	1	160	C7H18N3O	9.04	0.57	7	18	3
158	C12H14	13.19	0.8	12	14	0	160	C7H2N3O2	8.82	0.95	7	2	3
158	C12N	13.35	0.82	12	0	1	160	C7H20N4	9.41	0.4	7	20	4
158	C13H2	14.08	0.92	13	2	0	160	C7H4N4O	9.19	0.58	7	4	4
							160	C8H16O3	9.02	0.96	8	16	0
159	C5H7N2O4	6.43	0.98	5	7	2	160	C8O4	8.8	1.14	8	0	0
159	C5H9N3O3	6.81	0.8	5	9	3	160	C8H18NO2	9.39	0.79	8	18	1
159	C5H11N4O2	7.18	0.63	5	11	4	160	C8H2NO3	9.18	0.97	8	2	1
159	C6H9NO4	7.17	1.02	6	9	1	160	C8H20N2O	9.77	0.63	8	20	2
159	C6H11N2O3	7.54	0.85	6	11	2	160	C8H3N2O2	9.55	0.81	8	3	2
159	C6H13N3O2	7.91	0.68	6	13	3	160	C8H6N3O	9.92	0.64	8	6	3
159	C6H15N4O	8.29	0.51	6	15	4	160	C8H8N4	10.3	0.48	8	8	4
159	C7H11O4	7.9	1.07	7	11	0	160	C9H20O2	10.12	0.86	9	20	0
159	C7H13NO3	8.27	0.9	7	13	1	160	C9H4O3	9.91	1.04	9	4	0
159	C7H15N2O2	8.65	0.73	7	15	2	160	C9H6NO2	10.28	0.88	9	6	1
159	C7H17N3O	9.02	0.56	7	17	3	160	C9H8N2O	10.66	0.71	9	8	2
159	C7HN3O2	8.8	0.75	7	1	3	160	C9H10N3	11.03	0.55	9	10	3
159	C7H19N4	9.39	0.4	7	19	4	160	C10H8O2	11.01	0.95	10	8	0
159	C7H3N4O	9.18	0.58	7	3	4	160	C10H10NO	11.39	0.79	10	10	1
159	C8H15O3	9,00	0.96	8	15	0	160	C10H12N2	11.76	0.63	10	12	2
159	C8H17NO2	9.38	0.79	8	17	1	160	C11H12O	12.12	0.87	11	12	0
159	C8HNO3	9.16	0.97	8	1	1	160	C11H14N	12.49	0.72	11	14	1
159	C8H19N2O	9.75	0.63	8	19	2	160	C11N2	12.65	0.73	11	0	2
159	C8H3N2O2	9.56	0.81	8	3	2	160	C12H16	13.22	0.8	12	16	0
159	C8H21N3	10.13	0.86	8	21	3	160	C12O	13.01	0.98	12	0	0
159	C8H5N3O	9.91	0.64	8	5	2	160	C12H2N	13.38	0.82	12	2	1
159	C8H7N4	10.28	0.48	8	7	4	160	C13H4	14.11	0.92	13	4	0
159	C9H19O2	10.11	0.86	9	19	0							
159	C9H3O3	9.89	1.04	9	3	0	161	C5H9N2O4	6.47	0.98	5	9	2
159	C9H21NO	10.48	0.7	9	21	1	161	C5H11N3O3	6.84	0.8	5	11	3
159	C9H5NO2	10.27	0.87	9	5	1	161	C5H13N4O2	7.22	0.63	5	13	4
159	C9H7N2O	10.64	0.71	9	7	2	161	C6H11NO4	7.2	1.03	6	11	1
159	C9H9N3	11.01	0.55	9	9	3	161	C6H13N2O3	7.57	0.85	6	13	2
159	C10H7O2	11,00	0.95	10	7	0	161	C6H15N3O2	7.95	0.68	6	15	3
159	C10H9NO	11.36	0.79	10	9	1	161	C6H17N4O	8.32	0.51	6	17	4
159	C10H11N2	11.74	0.63	10	11	2	161	C6HN4O2	8.1	0.69	6	1	4
159	C11H11O	12.1	0.87	11	11	0	161	C7H13O4	7.93	1.08	7	13	0
159	C11H13N	12.48	0.71	11	13	1	161	C7H15NO3	8.3	0.9	7	15	1
159	C12H15	13.21	0.8	12	15	0	161	C7H17N2O2	8.68	0.74	7	17	2
159	C12HN	13.36	0.82	12	1	1	161	C7HN2O3	8.46	0.92	7	1	2
159	C13H3	14.1	0.92	13	3	0	161	C7H19N3O	9.05	0.57	7	19	3
							161	C7H3N3O2	8.83	0.75	7	3	3
160	C5H8N2O4	6.45	0.98	5	8	2	161	C7H5N4O	9.21	0.58	7	5	4

161	C8H17O3	9.03	0.96	8	17	0	162	C11NO	12.31	0.89	11	0	1
161	C8HO4	8.82	1.14	8	1	0	162	C11H2N2	12.68	0.74	11	2	2
161	C8H19NO2	9.41	0.8	8	19	1	162	C12I8	13.26	0.81	12	18	0
161	C8H3NO3	9.19	0.98	8	3	1	162	C12H2O	13.04	0.98	12	2	0
161	C8H5N2O2	9.57	0.81	8	5	2	162	C12H4N	13.41	0.83	12	4	1
161	C8H7N3O	9.94	0.65	8	7	3	162	C13H6	14.14	0.92	13	6	0
161	C8H9N4	10.31	0.48	8	9	4							
161	C9H5O3	9.92	1.04	9	5	0	163	C5H11N2O4	6.5	0.98	5	11	2
161	C9H7NO2	10.3	0.88	9	7	1	163	C5H13N3O3	6.87	0.81	5	13	3
161	C9H9N2O	10.67	0.72	9	9	2	163	C5H15N4O2	7.25	0.63	5	15	4
161	C9H11N3	11.05	0.56	9	11	3	163	C6H13NO4	7.23	1.03	6	13	1
161	C10H9O2	11.03	0.95	10	9	0	163	C6H15N2O3	7.6	0.85	6	15	2
161	C10H11NO	11.4	0.79	10	11	1	163	C6H17N3O2	7.98	0.68	6	17	3
161	C10H13N2	11.78	0.63	10	13	2	163	C6HN3O3	7.76	0.87	6	1	3
161	C11H13O	12.13	0.87	11	13	0	163	C6H3N4O2	8.14	0.69	6	3	4
161	C11H15N	12.51	0.72	11	15	1	163	C7H15O4	7.96	1.08	7	15	0
161	C11HN2	12.67	0.74	11	1	2	163	C7H17NO3	8.33	0.91	7	17	2
161	C12H17	13.24	0.81	12	17	0	163	C7HNO4	8.12	1.09	7	1	1
161	C12HO	13.02	0.98	12	1	0	163	C7H3N2O3	8.49	0.92	7	3	2
161	C12H3N	13.4	0.83	12	3	1	163	C7H5N3O2	8.87	0.75	7	5	3
161	C13H5	14.13	0.92	13	5	0	163	C7H7N4O	9.24	0.58	7	7	4
							163	C8H3O4	8.85	1.15	8	3	0
162	C5H10N2O4	6.48	0.98	5	10	2	163	C8H5NO3	9.22	0.98	8	5	1
162	C5H12N3O3	6.86	0.81	5	12	3	163	C8H7N2O2	9.6	0.81	8	7	2
162	C5H14N4O2	7.23	0.63	5	14	4	163	C8H9N3O	9.97	0.65	8	9	3
162	C6H12NO4	7.21	1.03	6	12	1	163	C8H11N4	10.35	0.49	8	11	4
162	C6H14N2O3	7.59	0.85	6	14	2	163	C9H7O3	9.95	1.04	9	7	0
162	C6H16N3O2	7.96	0.68	6	16	3	163	C9H9NO2	10.33	0.88	9	9	1
162	C6N3O3	7.75	0.86	6	0	3	163	C9H11N2O	10.7	0.72	9	11	2
162	C6H18N4O	8.34	0.51	6	18	4	163	C9H13N3	11.08	0.56	9	13	3
162	C6H2N4O2	8.12	0.69	6	2	4	163	C10H11O2	11.06	0.95	10	11	0
162	C7H14O4	7.94	1.08	7	14	0	163	C10H13NO	11.43	0.8	10	13	1
162	C7H16NO3	8.32	0.91	7	16	1	163	C10H15N2	11.81	0.64	10	15	2
162	C7NO4	8.1	1.09	7	0	1	163	C10HN3	11.97	0.66	10	1	3
162	C7H18N2O2	8.69	0.74	7	18	2	163	C11H15O	12.17	0.88	11	15	0
162	C7H2N2O3	8.48	0.92	7	2	2	163	C11H17N	12.54	0.72	11	17	1
162	C7H4N3O2	8.85	0.75	7	4	3	163	C11HNO	12.32	0.89	11	1	1
162	C7H6N4O	9.23	0.58	7	6	4	163	C11H3N2	12.7	0.74	11	3	2
162	C8H18O3	9.05	0.96	8	18	0	163	C12H19	13.27	0.81	12	19	0
162	C8H2O4	8.83	1.15	8	2	0	163	C12H3O	13.05	0.98	12	3	0
162	C8H4NO3	9.21	0.98	8	4	1	163	C12H5N	13.43	0.83	12	5	1
162	C8H6N2O2	9.58	0.81	8	6	2	163	C13H7	14.16	0.93	13	7	0
162	C8H8N3O	9.96	0.65	8	8	3							
162	C8H10N4	10.33	0.48	8	10	4	164	C5H12N2O4	6.51	0.98	5	12	2
162	C9H6O3	9.94	1.04	9	6	0	164	C5H14N3O3	6.89	0.81	5	14	3
162	C9H8NO2	10.31	0.88	9	8	1	164	C5H16N4O2	7.26	0.63	5	16	4
162	C9H10N2O	10.69	0.72	9	10	2	164	C6H14NO4	7.25	1.03	6	14	1
162	C9H12N3	11.06	0.56	9	12	3	164	C6H16N2O3	7.62	0.86	6	16	2
162	C10H10O2	11.04	0.95	10	10	0	164	C6N2O4	7.4	1.04	6	0	2
162	C10H12NO	11.42	0.79	10	12	1	164	C6H2N3O3	7.78	0.87	6	2	3
162	C10H14N2	11.79	0.64	10	14	2	164	C6H4N4O2	8.15	0.7	6	4	4
162	C10N3	11.95	0.65	10	0	3	164	C7H16O4	7.98	1.08	7	16	0
162	C11H14O	12.15	0.87	11	14	0	164	C7H2NO4	8.13	1.09	7	2	1
162	C11H16N	12.52	0.72	11	16	1	164	C7H4N2O3	8.51	0.92	7	4	2

164	C7H6N3O2	8.88	0.75	7	6	3	165	C11H19N	12.57	0.73	11	19	1
164	C7H8N4O	9.26	0.59	7	8	4	165	C11H3NO	12.36	0.9	11	3	1
164	C8H4O4	8.87	1.15	8	4	0	165	C11H5N2	12.73	0.74	11	5	2
164	C8H6NO3	9.24	0.98	8	6	1	165	C12H21	13.3	0.81	12	21	0
164	C8H8N2O2	9.61	0.81	8	8	2	165	C12H5O	13.09	0.99	12	5	0
164	C8H10N3O	9.99	0.65	8	10	3	165	C12H7N	13.46	0.84	12	7	1
164	C8H12N4	10.36	0.49	8	12	4	165	C13H9	14.19	0.93	13	9	0
164	C9H8O3	9.97	1.05	9	8	0							
164	C9H10NO2	10.35	0.88	9	10	1	166	C5H14N2O4	6.55	0.99	5	14	2
164	C9H12N2O	10.72	0.72	9	12	2	166	C6H2N2O4	7.43	1.04	6	2	2
164	C9H14N3	11.09	0.56	9	14	3	166	C6H4N3O3	7.81	0.87	6	4	3
164	C9N4	11.25	0.58	9	0	4	166	C6H6N4O2	8.18	0.7	6	6	4
164	C10H12O2	11.08	0.96	10	12	0	166	C7H4NO4	8.17	1.09	7	4	1
164	C10H14NO	11.45	0.8	10	14	1	166	C7H6N2O3	8.54	0.92	7	6	2
164	C10H16N2	11.82	0.64	10	16	2	166	C7H8N3O2	8.91	0.76	7	8	3
164	C10N2O	11.61	0.81	10	0	2	166	C7H10N4O	9.29	0.59	7	10	4
164	C10H2N3	11.98	0.66	10	2	3	166	C8H6O4	8.9	1.15	8	6	0
164	C11H16O	12.18	0.88	11	16	0	166	C8H8NO3	9.27	0.98	8	8	1
164	C11O2	11.96	1.05	11	0	0	166	C8H10N2O2	9.65	0.82	8	10	2
164	C11H18N	12.56	0.72	11	18	1	166	C8H12N3O	10.02	0.65	8	12	3
164	C11H2NO	12.34	0.9	11	2	1	166	C8H14N4O	10.39	0.49	8	14	4
164	C11H4N2	12.71	0.74	11	4	2	166	C9H10O3	10	1.05	9	10	0
164	C12H2O	13.29	0.81	12	20	0	166	C9H12NO2	10.38	0.89	9	12	1
164	C12H4O	13.07	0.98	12	4	0	166	C9H14N2O	10.75	0.72	9	14	2
164	C12H6N	13.44	0.83	12	6	1	166	C9H16N3	11.13	0.56	9	16	3
164	C13H8	14.18	0.93	13	8	0	166	C9N3O	10.91	0.74	9	0	3
							166	C9H2N4	11.28	0.58	9	2	4
165	C5H13N2O4	6.53	0.98	5	13	2	166	C10H14O2	11.11	0.96	10	14	0
165	C5H15N3O3	6.9	0.81	5	15	3	166	C10H16NO	11.48	0.8	10	16	1
165	C6H15NO4	7.26	1.03	6	15	1	166	C10NO2	11.27	0.98	10	0	1
165	C6HN2O4	7.42	1.04	6	1	2	166	C10H18N2	11.86	0.64	10	18	2
165	C6H3N3O3	7.79	0.87	6	3	3	166	C10H2N2O	11.64	0.82	10	2	2
165	C6H5N4O2	8.17	0.7	6	5	4	166	C10H4N3	12.01	0.66	10	4	3
165	C7H3NO4	8.15	1.09	7	3	1	166	C11H18O	12.21	0.88	10	18	0
165	C7H5N2O3	8.52	0.92	7	5	2	166	C11H2O2	12	1.06	11	2	0
165	C7H7N3O2	8.9	0.75	7	7	3	166	C11H20N	12.59	0.73	11	20	1
165	C7H9N4O	9.27	0.59	7	9	4	166	C11H4NO	12.37	0.9	11	4	1
165	C8H5O4	8.88	1.15	8	5	0	166	C11H6N2	12.75	0.75	11	6	2
165	C8H7NO3	9.26	0.92	8	7	1	166	C12H22	13.32	0.82	12	22	0
165	C8H9N2O2	9.63	0.82	8	9	2	166	C12H6O	13.1	0.99	12	6	0
165	C8H11N3O	10	0.65	8	11	3	166	C12H8N	13.48	0.84	12	8	1
165	C8H13N4	10.38	0.49	8	13	4	166	C13H10	14.21	0.93	13	10	0
165	C9H9O3	9.99	1.05	9	9	0							
165	C9H11NO2	10.36	0.88	9	11	1	167	C6H3N2O4	7.45	1.04	6	3	2
165	C9H13N2O	10.74	0.72	9	13	2	167	C6H5N3O3	7.83	0.87	6	5	3
165	C9H15N3	11.11	0.56	9	15	3	167	C6H7N4O2	8.2	0.7	6	7	4
165	C9HN4	11.27	0.58	9	1	4	167	C7H5NO4	8.18	1.1	7	5	1
165	C10H13O2	11.09	0.96	10	13	0	167	C7H7N2O3	8.56	0.93	7	7	2
165	C10H15NO	11.47	0.8	10	15	1	167	C7H9N3O2	8.93	0.76	7	9	3
165	C10H17N2	11.84	0.64	10	17	2	167	C7H11N4O	9.31	0.59	7	11	4
165	C10HN2O	11.62	0.82	10	1	2	167	C8H7O4	8.91	1.15	8	7	0
165	C10H3N3	12	0.66	10	3	3	167	C8H9NO3	9.29	0.99	8	9	1
165	C11H17O	12.2	0.88	11	17	0	167	C8H11N2O2	9.66	0.82	8	11	2
165	C11HO2	11.98	1.05	11	1	0	167	C8H13N3O	10.04	0.66	8	13	3



167	C8H15N4	10.41	0.49	8	15	4	168	C11H8N2	12.78	0.75	11	8	2
167	C9H11O3	10.02	1.05	9	11	0	168	C12H24	13.35	0.82	12	24	0
167	C9H13NO2	10.39	0.89	9	13	1	168	C12H8O	13.13	0.99	12	8	0
167	C9H15N2O	10.77	0.73	9	15	2	168	C12H10N	13.51	0.84	12	10	1
167	C9H17N3	11.14	0.57	9	17	3	168	C13H12	14.24	0.94	13	12	0
167	C9HN3O	10.92	0.74	9	1	3	168	C14	15.13	1.06	14	0	0
167	C9H3N4	11.3	0.58	9	3	4							
167	C10H15O2	11.12	0.96	10	15	0	169	C6H5N2O4	7.48	1.05	6	5	2
167	C10H17NO	11.5	0.8	10	17	1	169	C6H7N3O3	7.86	0.87	6	7	3
167	C10HNO2	11.28	0.98	10	1	1	169	C6H9N4O2	8.23	0.7	6	9	4
167	C10H19N2	11.87	0.64	10	19	2	169	C7H7NO4	8.21	1.1	7	7	1
167	C10H3N2O	11.66	0.82	10	3	2	169	C7H9N2O3	8.59	0.93	7	9	2
167	C10H5N3	12.03	0.66	10	5	3	169	C7H11N3O2	8.96	0.76	7	11	3
167	C11H19O	12.23	0.88	11	19	0	169	C7H13N4O	9.34	0.59	7	13	4
167	C11H3O2	12.01	1.06	11	3	0	169	C8H9O4	8.95	1.16	8	9	0
167	C11H21N	12.6	0.73	11	21	1	169	C8H11NO3	9.32	0.99	8	11	1
167	C11H5NO	12.39	0.9	11	5	1	169	C8H13N2O2	9.69	0.82	8	13	2
167	C11H7N2	12.76	0.75	11	7	2	169	C8H15N3O	10.07	0.66	8	15	3
167	C12H23	13.34	0.82	12	23	0	169	C8H17N4	10.44	0.5	8	17	4
167	C12H7O	13.12	0.99	12	7	0	169	C8HN4O	10.23	0.67	8	1	4
167	C12H9N	13.49	0.84	12	9	1	169	C9H13O3	10.05	1.05	9	13	0
167	C13H11	14.22	0.94	13	11	0	169	C9H15NO2	10.43	0.89	9	15	1
							169	C9H17N2O	10.8	0.73	9	17	2
168	C6H4N2O4	7.47	1.04	6	4	2	169	C9HN2O2	10.52	0.91	9	1	2
168	C6H6N3O3	7.84	0.87	6	6	3	169	C9H19N3	11.17	0.57	9	9	3
168	C6H8N4O2	8.22	0.7	6	8	4	169	C9H3N3O	10.96	0.75	9	3	3
168	C7H6NO4	8.2	1.1	7	6	1	169	C9H5N4	11.33	0.59	9	5	4
168	C7H8N2O3	8.57	0.93	7	8	2	169	C10H17O2	11.16	0.96	10	17	0
168	C7H10N3O2	8.95	0.76	7	10	3	169	C10HO3	10.94	1.14	10	1	0
168	C7H12N4O	9.32	0.59	7	12	4	169	C10H19NO	11.53	0.81	10	19	1
168	C8H8O4	8.93	1.15	8	8	0	169	C10H3NO2	11.31	0.98	10	3	1
168	C8H10NO3	9.3	0.99	8	10	1	169	C10H21N2	11.9	0.65	10	21	2
168	C8H12N2O2	9.68	0.82	8	12	2	169	C10H5N2O	11.69	0.82	10	5	2
168	C8H14N3O	10.05	0.66	8	14	3	169	C10H7N3	12.06	0.67	10	7	3
168	C8H16N4	10.43	0.49	8	16	4	169	C11H21O	12.26	0.89	11	21	0
168	C8N4O	10.21	0.67	8	0	4	169	C11H5O2	12.04	1.06	11	5	2
168	C9H12O2	10.03	1.05	9	12	0	169	C11H23N	12.64	0.73	11	23	1
168	C9H14NO2	10.41	0.89	9	14	1	169	C11H7NO	12.42	0.91	11	7	1
168	C9H16N2O	10.78	0.73	9	16	2	169	C11H9N2	12.79	0.75	11	9	2
168	C9N2O2	10.57	0.51	9	0	2	169	C12H25	13.37	0.82	12	25	0
168	C9H18N3	11.16	0.57	9	18	3	169	C12H9O	13.15	1.00	12	9	9
168	C9H2N3O	10.94	0.74	9	2	3	169	C12H11N	13.52	0.84	12	11	1
168	C9H4N4	11.32	0.58	9	4	4	169	C13H13	14.26	0.94	13	13	0
168	C10H16O2	11.14	0.96	10	16	0	169	C14H	15.14	1.07	14	1	0
168	C10O3	10.92	1.14	10	0	0							
168	C10H16NO	11.51	0.8	10	18	1	170	C6H6N2O4	7.5	1.05	6	6	2
168	C10H2NO2	11.3	0.98	10	2	1	170	C6H8N3O3	7.87	0.87	6	8	3
168	C10H20N2	11.89	0.65	10	20	2	170	C6H10N4O2	8.25	0.7	6	10	4
168	C10H4N2O	11.67	0.82	10	4	2	170	C7H8NO4	8.23	1.1	7	8	1
168	C10H6N3	12.05	0.67	10	6	3	170	C7H10N2O3	8.6	0.93	7	10	2
168	C11H20O	12.25	0.89	11	20	0	170	C7H12N3O2	8.98	0.76	7	12	3
168	C11H4O2	12.03	1.06	11	4	0	170	C7H14N4O	9.35	0.59	7	14	4
168	C11H22N	12.62	0.73	11	22	1	170	C8H10O4	8.96	1.16	8	10	0
168	C11H6NO	12.4	0.9	11	6	1	170	C8H12NO3	9.34	0.99	8	12	1

170	C8H14N2O2	9.71	0.82	8	14	2	171	C10H19O2	11.19	0.97	10	19	0
170	C8H16N3O	10.08	0.66	8	16	3	171	C10H3O3	10.97	1.14	10	3	0
170	C8N3N2	9.87	0.84	8	3	2	171	C10H21NO	11.56	0.81	10	21	1
170	C8H18N4	10.46	0.5	8	18	4	171	C10H5NO2	11.35	0.99	10	5	1
170	C8H2N4O	10.24	0.68	8	2	4	171	C10H23N2	11.94	0.65	10	23	2
170	C9H14O3	10.07	1.06	9	14	0	171	C10H7N2O	11.72	0.83	10	7	2
170	C9H16NO2	10.44	0.89	9	16	1	171	C10H9N3	12.09	0.67	10	9	3
170	C9NO3	10.22	1.07	9	0	1	171	C11H23O	12.29	0.89	11	23	0
170	C9H18N2O	10.82	0.73	9	18	2	171	C11H7O2	12.08	1.07	11	7	0
170	C9H2N2O2	10.6	0.91	9	2	2	171	C11H25N	12.67	0.74	11	25	1
170	C9H20N3	11.19	0.57	9	20	3	171	C11H9NO	12.45	0.91	11	9	1
170	C9H4N3O	10.97	0.75	9	4	3	171	C11H11N2	12.83	0.76	11	11	2
170	C9H6N4	11.35	0.59	9	6	4	171	C12H11O	13.18	1	12	11	0
170	C10H18O2	11.17	0.97	10	18	0	171	C12H13N	13.56	0.85	12	13	1
170	C10H2O3	10.96	1.14	10	2	0	171	C13H15	14.29	0.94	13	15	0
170	C10H20NO	11.55	0.81	10	20	1	171	C13HN	14.45	0.97	13	1	1
170	C10H4NO2	11.33	0.92	10	4	1	171	C14H3	15.18	1.07	14	3	0
170	C10H22N2	11.92	0.65	10	22	2							
170	C10H6N2O	11.7	0.83	10	6	2	172	C6H8N2O4	7.53	1.05	6	8	2
170	C10H8N3	12.08	0.67	10	8	3	172	C6H10N3O3	7.91	0.88	6	10	3
170	C11H22O	12.28	0.89	11	22	0	172	C6H12N4O2	8.28	0.71	6	12	4
170	C11H6O2	12.06	1.06	11	6	0	172	C7H10NO4	8.26	1.1	7	10	1
170	C11H24N	12.65	0.74	11	24	1	172	C7H12N2O3	8.64	0.93	7	12	2
170	C11H8NO	12.44	0.91	11	8	1	172	C7H14N3O2	9.01	0.76	7	14	3
170	C11H10N2	12.81	0.75	11	10	2	172	C7H16N4O	9.39	0.6	7	16	4
170	C12H26	13.38	0.83	12	26	0	172	C7N4O2	9.17	0.78	7	0	4
170	C12H10O	13.17	1.00	12	10	0	172	C8H12O4	8.99	1.16	8	12	0
170	C12H12N	13.54	0.85	12	12	1	172	C8H14NO3	9.37	0.99	8	14	1
170	C13H14	14.27	0.94	13	14	0	172	C8H16N2O2	9.74	0.83	8	16	2
170	C13N	14.43	0.96	13	0	1	172	C8N2O3	9.52	1.01	8	0	2
170	C14H2	15.16	1.07	14	2	0	172	C8H16N3O	10.12	0.66	8	16	3
							172	C8H2N3O2	9.9	0.84	8	2	3
171	C6H7N2O4	7.51	1.05	6	7	2	172	C8H20N4	10.49	0.5	8	20	4
171	C6H9N23O3	7.89	0.88	6	9	23	172	C8H4N4O	10.27	0.68	8	4	4
171	C6H11N4O2	8.26	0.7	6	11	4	172	C9H16O3	10.1	1.06	9	16	0
171	C7H9NO4	8.25	1.1	7	9	1	172	C9O4	9.88	1.24	9	0	0
171	C7H11NO3	8.62	0.93	7	11	2	172	C9H18NO2	10.47	0.9	9	18	1
171	C7H13N3O2	8.99	0.76	7	13	3	172	C9H2NO3	10.26	1.07	9	2	1
171	C7H15N1O	9.37	0.6	7	15	4	172	C9H20N2O	10.85	0.73	9	20	2
171	C8H11O4	8.98	1.16	8	11	0	172	C9H4N2O2	10.63	0.91	9	4	2
171	C8H13NO3	9.35	0.99	8	13	1	172	C9H22N3	11.22	0.57	9	22	3
171	C8H15N2O2	9.73	0.83	8	15	2	172	C9H6N3O	11	0.75	9	6	3
171	C8H17N3O	10.1	0.66	8	17	3	172	C9H8N4	11.38	0.59	9	8	4
171	C8HN3O2	9.88	0.84	8	1	3	172	C10H20O2	11.2	0.97	10	20	0
171	C8H19N4	10.47	0.5	8	19	4	172	C10H4O3	10.99	1.15	10	4	0
171	C8H3N4O	10.26	0.68	8	3	4	172	C10H22NO	11.58	0.81	10	22	1
171	C9H15O3	10.08	1.06	9	15	0	172	C10H6NO2	11.36	0.99	10	6	1
171	C9H17NO2	10.46	0.89	9	17	1	172	C10H24N2	11.95	0.65	10	24	2
171	C9HNO3	10.24	1.07	9	1	1	172	C10H8N2O	11.74	0.83	10	8	2
171	C9H19N2O	10.83	0.73	9	19	2	172	C10H10N3	12.11	0.67	10	10	3
171	C9H3N2O2	10.61	0.91	9	3	2	172	C11H24O	12.31	0.89	11	24	0
171	C9H21N3	11.21	0.57	9	21	3	172	C11H8O2	12.09	1.07	11	8	0
171	C9H5N3O	10.99	0.75	9	5	3	172	C11H10NO	12.47	0.91	11	10	1
171	C9H7N4	11.36	0.59	9	5	4	172	C11H12N2	12.84	0.76	11	12	2

172	C12H12O	13.2	1	12	12	0	174	C7H14N2O3	8.67	0.93	7	14	2
172	C12H14N	13.57	0.85	12	14	1	174	C7H16N3O2	9.04	0.77	7	16	3
172	C12N2	13.73	0.87	12	0	2	174	C7N3O3	8.83	0.95	7	3	0
172	C13H16	14.3	0.95	13	16	0	174	C7H18N4O	9.42	0.6	7	18	4
172	C13O	14.09	1.12	13	0	0	174	C7H2N4O2	9.2	0.78	7	2	4
172	C13H2N	14.46	0.97	13	2	1	174	C8H14O4	9.03	1.16	8	14	0
172	C14H4	15.19	1.07	14	4	0	174	C8H16NO3	9.4	1	8	16	1
							174	C8NO4	9.18	1.18	8	0	1
173	C6H9N2O4	7.55	1.05	6	9	2	174	C8H18N2O2	9.77	0.83	8	18	2
173	C6H11N3O3	7.92	0.88	6	11	3	174	C8H2N2O3	9.56	1.01	8	2	2
173	C6H13N4O2	8.3	0.71	6	13	4	174	C8H20N3O	10.15	0.67	8	20	3
173	C7H11NO4	8.28	1.1	7	11	1	174	C8H14N3O2	9.93	0.85	8	14	3
173	C7H13N2O3	8.65	0.93	7	13	2	174	C8H22N4	10.52	0.5	8	22	4
173	C7H15N3O2	9.03	0.77	7	15	3	174	C8H6N4O	10.31	0.68	8	6	4
173	C7H17N4O	9.4	0.62	7	17	4	174	C9H18O3	10.13	1.06	9	18	0
173	C7HN4O2	9.18	0.78	7	1	4	174	C9H2O4	9.91	1.24	9	2	0
173	C8H13O4	9.01	1.16	8	13	0	174	C9H20NO2	10.51	0.9	9	20	1
173	C8H15NO3	9.38	0.99	8	15	1	174	C9H4NO3	10.29	1.08	9	4	1
173	C8H17N2O2	9.76	0.83	8	17	2	174	C9H22N2O	10.88	0.74	9	22	1
173	C8HN2O3	9.54	1.01	8	1	2	174	C9H6N2O2	10.66	0.92	9	6	2
173	C8H19N3O	10.13	0.66	8	19	3	174	C9H8N3O	11.04	0.75	9	8	3
173	C8H3N3O2	9.92	0.84	8	3	3	174	C9H10N4	11.41	0.6	9	10	4
173	C8H21N4	10.51	0.5	8	21	4	174	C10H22O2	11.24	0.97	10	22	0
173	C8H5N4O	10.29	0.68	8	5	4	174	C10H6O3	11.02	1.15	10	6	0
173	C9H17O3	10.11	1.06	9	17	0	174	C10H8NO2	11.39	0.99	10	8	1
173	C9HO4	9.9	1.24	9	1	0	174	C10H10N2O	11.77	0.83	10	10	2
173	C9H19NO2	10.49	0.9	9	19	1	174	C10H12N3	12.14	0.68	10	12	3
173	C9H3NO3	10.27	1.08	9	3	1	174	C11H10O2	12.12	1.07	10	10	0
173	C9H21N2O	10.86	0.74	9	21	2	174	C11H12NO	12.5	0.92	11	12	1
173	C9H5N2O2	10.65	0.91	9	5	2	174	C11H14N2	12.87	0.76	11	14	2
173	C9H23N3	11.24	0.58	9	23	2	174	C11N3	13.03	0.78	11	0	3
173	C9H7N3O	11.02	0.75	9	7	3	174	C12H14O	13.23	1.01	12	14	0
173	C9H9N4	11.4	0.59	9	9	4	174	C12H16N	13.6	0.85	12	16	1
173	C10H21O2	11.22	0.97	10	21	0	174	C12NO	13.39	1.03	12	0	1
173	C10H5O3	11	1.15	10	5	0	174	C12H2N2	13.76	0.88	12	2	2
173	C10H23NO	11.59	0.81	10	23	1	174	C13H18	14.34	0.95	13	18	0
173	C10H7NO2	11.38	0.99	10	7	1	174	C13H2O	14.12	1.12	13	2	0
173	C10H9N2O	11.75	0.83	10	9	2	174	C13H4N	14.49	0.97	13	4	1
173	C10H11N3	12.13	0.67	10	11	3	174	C14H6	15.22	1.08	14	6	0
173	C11H9O2	12.11	1.07	11	9	0							
173	C11H11NO	12.48	0.91	11	11	1	175	C6H11N2O4	7.58	1.05	6	11	2
173	C11H13N2	12.86	0.76	11	13	2	175	C6H13N3O3	7.95	0.88	6	13	3
173	C12H13O	13.21	1	12	13	0	175	C6H15N4O2	8.33	0.71	6	15	4
173	C12H15N	13.59	0.85	12	15	1	175	C7H13NO4	8.31	1.11	7	13	1
173	C12HN2	13.75	0.87	12	1	2	175	C7H15N2O3	8.68	0.94	7	15	2
173	C13H17	14.32	0.95	13	17	0	175	C7H17N3O2	9.06	0.77	7	17	3
173	C13HO	14.1	1.12	13	1	0	175	C7HN3O3	8.84	0.95	7	1	3
173	C13H3N	14.48	0.97	13	3	1	175	C7H19N4O	9.43	0.6	7	19	4
173	C14H5	15.21	1.07	14	5	0	175	C7H3N4O2	9.22	0.78	7	3	4
							175	C8H15O4	9.04	1.16	8	15	0
174	C6H10N2O4	7.56	1.05	6	10	2	175	C8H17NO3	9.42	1	8	17	1
174	C6H12N3O3	7.94	0.88	6	12	3	175	C8HNO4	9.2	1.18	8	1	1
174	C6H14N4O2	8.31	0.71	6	14	4	175	C8H19N2O2	9.79	0.83	8	19	2
174	C7H12NO4	8.29	1.1	7	12	1	175	C8H3N2O3	9.57	1.01	8	3	2

175	C8H21N3O	10.16	0.67	8	21	3	176	C10N4	12.33	0.7	10	0	4
175	C8H5N3O2	9.95	0.85	8	5	3	176	C11H12O2	12.16	1.08	11	12	0
175	C8H7N4O	10.32	0.68	8	7	4	176	C11H14NO	12.53	0.92	11	14	1
175	C9H19O3	10.15	1.06	9	19	0	176	C11H16N2	12.91	0.77	11	16	2
175	C9H3O4	9.93	1.24	9	3	0	176	C11N2O	12.69	0.94	11	0	2
175	C9H21NO2	10.52	0.9	9	21	1	176	C11H2N3	13.06	0.79	11	2	3
175	C9H5NO3	10.3	1.08	9	5	1	176	C12H16O	13.26	1.01	12	16	0
175	C9H7N2O2	10.68	0.92	9	7	2	176	C12O2	13.05	1.18	12	0	0
175	C9H9N3O	11.05	0.76	9	9	3	176	C12H18N	13.64	0.86	12	18	1
175	C9H11N4	11.43	0.6	9	11	4	176	C12H2NO	13.42	1.03	12	2	1
175	C10H7O3	11.04	1.15	10	7	0	176	C12H4N2	13.79	0.88	12	4	2
175	C10H9NO2	11.41	0.99	10	9	1	176	C13H2O	14.37	0.96	13	20	0
175	C10H11N2O	11.78	0.83	10	11	2	176	C13H4O	14.15	1.13	13	4	0
175	C10H13N3	12.16	0.68	10	13	3	176	C13H6N	14.53	0.98	13	6	1
175	C11H11O2	12.14	1.07	11	11	0	176	C14H8	15.26	1.08	14	8	0
175	C11H13NO	12.52	0.92	11	13	1							
175	C11H15N2	12.89	0.77	11	15	2	177	C6H13N2O4	7.61	1.06	6	13	2
175	C11HN3	13.05	0.78	11	1	3	177	C6H15N3O3	7.29	0.88	6	15	3
175	C12H15O	13.25	1.01	12	15	0	177	C6H17N4O2	8.36	0.71	6	17	4
175	C12H17N	13.62	0.86	12	17	1	177	C7H15NO4	8.34	1.11	7	15	1
175	C12HNO	13.4	1.03	12	1	1	177	C7H17N2O3	8.72	0.94	7	17	2
175	C12H3N2	13.78	0.88	12	3	2	177	C7HN2O4	8.5	1.12	7	1	2
175	C13H19	14.35	0.95	13	19	0	177	C7H19N3O2	9.09	0.77	7	19	3
175	C13H3O	14.13	1.12	13	1	3	177	C7H3N3O3	8.87	0.95	7	3	3
175	C13H5N	14.51	0.98	13	5	1	177	C7H5N4O2	9.25	0.78	7	5	4
175	C14H7	15.24	1.08	14	7	0	177	C8H17O4	9.07	1.17	8	17	0
							177	C8H19NO3	9.45	1.00	8	19	1
176	C6H12N2O4	7.59	1.05	6	12	2	177	C8H3NO4	9.23	1.18	8	3	1
176	C6H14N3O3	7.97	0.88	6	14	3	177	C8H5N2O3	9.6	1.01	8	5	2
176	C6H16N4O2	8.34	0.71	6	16	4	177	C8H7N3O2	9.98	0.85	8	7	3
176	C7H14NO4	8.33	1.11	7	14	1	177	C8H9N4O	10.35	0.69	8	9	4
176	C7H16N2O3	8.7	0.94	7	16	2	177	C9H5O4	9.96	1.25	9	5	0
176	C7N2O4	8.48	1.12	7	0	2	177	C9H7NO3	10.34	1.08	9	7	1
176	C7H18N3O2	9.07	0.77	7	18	3	177	C9H9N2O2	10.71	0.92	9	9	2
176	C7H2N3O3	8.86	0.95	7	2	3	177	C9H11N3O	10.08	0.76	9	11	3
176	C7H20N4O	9.45	0.6	7	20	4	177	C9H13N4	11.46	0.6	9	13	4
176	C7H4N4O2	9.23	0.78	7	4	4	177	C10H9O3	11.07	1.16	10	9	0
176	C8H16O4	9.06	1.17	8	16	0	177	C10H11NO2	11.44	1.00	10	11	1
176	C8H18NO3	9.43	1	8	18	1	177	C10H13N2O	11.82	0.48	10	13	2
176	C8H2NO4	9.21	1.18	8	2	1	177	C10H15N3	12.19	0.68	10	15	3
176	C8H20N2O2	9.81	0.83	8	20	2	177	C10HN4	12.35	0.7	10	4	1
176	C8H4N2O3	9.59	1.01	8	4	2	177	C11H13O2	12.17	1.08	11	13	0
176	C8H6N3O2	9.96	0.85	8	6	3	177	C11H15NO	12.55	0.92	11	15	1
176	C8H8N4O	10.34	0.69	8	8	4	177	C11H17N2	12.92	0.77	11	1	2
176	C9H20O3	10.16	1.07	9	20	0	177	C11HN2O	12.7	0.94	11	1	2
176	C9H4O4	9.95	1.24	9	4	0	177	C11H3N3	13.08	0.79	11	3	3
176	C9H6NO3	10.32	1.08	9	6	1	177	C12H17O	13.28	1.01	12	17	0
176	C9H8N2O2	10.69	0.92	9	8	2	177	C12HO2	13.06	1.18	12	1	0
176	C9H10N3O	11.07	0.76	9	10	3	177	C12H13N	13.65	0.86	12	13	1
176	C9H12N4	11.44	0.6	9	12	4	177	C12H3NO	13.44	1.03	12	3	1
176	C10H8O3	11.05	1.15	10	8	0	177	C12H5N2	13.81	0.88	12	5	2
176	C10H10NO2	11.43	0.99	10	10	1	177	C13H21	14.38	0.96	13	21	0
176	C10H12N2O	11.8	0.84	10	12	2	177	C13H5O	14.17	1.13	13	5	0
176	C10H14N3	12.17	0.68	10	14	3	177	C13H7N	14.54	0.98	13	7	1

177	C14H9	15.27	1.08	14	9	0	179	C9H11N2O2	10.74	0.92	9	11	2
							179	C9H13N3O	11.12	0.76	9	13	3
178	C6H14N2O4	7.63	1.06	6	14	2	179	C9H15N4	11.49	0.6	9	15	4
178	C6H16N3O3	8,00	0.88	6	16	3	179	C10H11O3	11.1	1.16	10	11	0
178	C6H18N4O2	8.38	0.71	6	18	4	179	C10H13NO2	11.47	1	10	13	1
178	C7H16NO4	8.36	1.11	7	16	1	179	C10H15N2O	11.85	0.84	10	15	2
178	C7H18N2O3	8.73	0.94	7	18	2	179	C10H17N3	12.22	0.69	10	17	3
178	C7H2N2O4	8.52	1.12	7	2	2	179	C10HN3O	12.01	0.86	10	1	3
178	C7H4N3O3	8.89	0.95	7	4	3	179	C10H3N4	12.38	0.71	10	3	4
178	C7H6N4O2	9.26	0.79	7	6	4	179	C11H15O2	12.2	1.08	11	15	0
178	C8H18O4	9.09	1.17	8	18	0	179	C11H17NO	12.58	0.93	11	17	1
178	C8H4NO4	9.25	1.18	8	4	1	179	C11HNO2	12.36	1.1	11	1	1
178	C8H6N2O3	9.62	1.02	8	6	2	179	C11H19N2	12.95	0.77	11	19	2
178	C8H8N3O2	10,00	0.85	8	8	3	179	C11H3N2O	12.74	0.95	11	3	2
178	C8H10N4O	10.37	0.69	8	10	4	179	C11H5N3	13.11	0.79	11	5	3
178	C9H6O4	9.98	1.25	9	6	0	179	C12H19O	13.31	1.02	12	19	0
178	C9H8NO3	10.35	1.08	9	8	1	179	C12H3O2	13.09	1.19	12	3	0
178	C9H10N2O2	1.73	0.92	9	10	2	179	C12H21N	13.68	0.87	12	21	1
178	C9H12N3O	11.1	0.76	9	12	3	179	C12H5NO	13.47	1.04	12	5	1
178	C9H14N4	11.48	0.6	9	14	4	179	C12H7N2	13.84	0.89	12	7	2
178	C10H10O3	11.08	1.16	10	10	0	179	C13H23	14.42	0.96	13	23	0
178	C10H12NO2	11.46	1,00	10	12	1	179	C13H7O	14.2	1.13	13	7	0
178	C10H14N2O	11.83	0.84	10	14	2	179	C13H9N	14.57	0.99	13	9	0
178	C10H16N3	12.21	0.68	10	16	3	179	C14H11	15.3	1.09	14	11	0
178	C10N3O	11.99	0.86	10	0	3							
178	C10H2N4	12.36	0.7	10	2	4	180	C6H16N2O4	7.66	1.06	6	6	2
178	C11H14O2	12.19	1.08	11	14	0	180	C7H4N2O4	8.55	1.12	7	4	2
178	C11H16NO	12.56	0.96	11	16	1	180	C7H6N3O3	8.92	0.96	7	6	3
178	C11NO2	12.35	1.1	11	0	1	180	C7H8N4O2	9.3	0.79	7	8	4
178	C11H18N2	12.94	0.77	11	18	2	180	C8H6NO4	9.28	1.18	8	6	1
178	C11H2N2O	12.72	0.94	11	2	2	180	C8H8N2O2	9.65	1.02	8	8	2
178	C11H4N3	13.09	0.79	11	4	3	180	C8H10N3O2	10.03	0.85	8	10	3
178	C12H18O	13.29	1.01	11	18	0	180	C8H12N4O	10.4	0.69	8	12	4
178	C12H2O2	13.08	1.19	12	2	0	180	C9H8O4	10.01	1.25	9	8	0
178	C12H20N	13.67	0.86	12	20	1	180	C9H12NO3	10.38	1.09	9	12	1
178	C12H4NO	13.45	1.03	12	4	1	180	C9H12N2O2	10.76	0.93	9	12	2
178	C12H6N2	13.83	0.88	12	6	2	180	C9H14N3O	11.13	0.77	9	14	3
178	C13H22	14.4	0.96	13	22	0	180	C9H16N4	11.51	0.61	9	16	4
178	C13H6O	14.18	1.13	13	6	0	180	C9N4O	11.29	0.78	9	0	4
178	C13H8N	14.56	0.98	13	8	1	180	C10H12O3	11.12	1.16	10	12	0
178	C14H10	15.29	1.09	14	10	0	180	C10H14NO2	11.49	1	10	14	1
							180	C10H16N2O	11.86	0.84	10	16	2
179	C6H15N2O4	7.64	1.06	6	15	2	180	C10N2O2	11.65	1.02	10	0	2
179	C6H17N3O3	8.02	0.89	6	17	3	180	C10H18N3	12.24	0.69	10	18	3
179	C7H17NO4	8.37	1.11	7	17	1	180	C10H2N3O	12.02	0.86	10	2	3
179	C7H3N2O4	8.53	1.12	7	3	2	180	C10H4N4	12.4	0.71	10	4	4
179	C7H5N3O3	8.91	0.95	7	5	3	180	C11H16O2	12.22	1.08	11	16	0
179	C7H7N4O2	9.28	0.79	7	7	4	180	C11O3	12,00	1.26	11	0	0
179	C8H5NO4	9.26	1.18	8	5	1	180	C11H18NO	12.6	0.93	11	18	1
179	C8H7N2O3	9.64	1.02	8	7	2	180	C11H2NO2	12.38	1.1	11	2	1
179	C8H9N3O2	10.01	0.85	8	9	3	180	C11H20N2	12.97	0.78	11	20	2
179	C8H11N4O	10.39	0.69	8	11	4	180	C11H4N2O	12.75	0.95	11	4	2
179	C9H7O4	9.99	1.25	9	7	0	180	C11H6N3	13.13	0.8	11	6	3
179	C9H9NO3	10.37	1.09	9	9	1	180	C12H20O	13.33	1.02	12	20	0

180	C12H4O2	13.11	1.19	12	4	0	182	C8H14N4O	10.43	0.7	8	14	4
180	C12H212N	13.7	0.87	12	22	1	182	C9H10O4	10.04	1.25	9	10	0
180	C12H6NO	13.48	1.04	12	6	1	182	C9H12NO3	10.42	1.09	9	12	1
180	C12H8N2	13.86	0.89	12	8	2	182	C9H14N2O2	10.79	0.93	9	14	2
180	C13H24	14.43	0.97	13	4	0	182	C9H16N3O	11.16	0.77	9	16	3
180	C13H28O	14.21	1.13	13	28	0	182	C9N3O2	10.95	0.95	9	3	0
180	C13H10N	14.59	0.99	13	10	1	182	C9H18N4	11.54	0.61	9	18	4
180	C14H12	15.32	1.09	14	12	0	182	C9H2N4O	11.32	0.79	9	2	4
180	C15	16.21	1.23	15	0	0	182	C10H14O3	11.15	1.16	10	14	0
							182	C10H16NO2	11.52	1.01	10	16	1
181	C7H5N2O4	8.56	1.13	7	5	2	182	C10NO3	11.3	1.18	10	0	1
181	C7H7N3O3	8.94	0.96	7	7	3	182	C10H18N2O	11.9	0.85	10	18	2
181	C7H9N4O2	9.31	0.79	7	9	4	182	C10H2N2O2	11.68	1.02	10	2	2
181	C8H7NO4	9.29	1.19	8	7	1	182	C10H20N3	12.27	0.69	10	20	3
181	C8H9N2O3	9.67	1.02	8	9	2	182	C10H4N3O	12.05	0.87	10	4	3
181	C8H11N3O2	10.04	0.86	8	11	3	182	C10H6N4	12.43	0.71	10	6	4
181	C8H16N4O	10.42	0.69	8	16	4	182	C11H18O2	12.25	1.09	11	18	0
181	C9H9O4	10.03	1.25	9	9	0	182	C11H2O3	12.04	1.26	11	2	0
181	C9H11NO3	10.4	1.09	9	11	1	182	C11H20NO	12.63	0.93	11	20	1
181	C9H13N2O2	10.77	0.93	9	13	2	182	C11H4NO2	12.41	1.11	11	4	1
181	C9H15N3O	1.15	0.77	9	15	3	182	C11H22N2	13	0.78	11	22	2
181	C9H16N4	10.52	0.61	9	16	4	182	C11H6N2O	12.78	0.95	11	6	2
181	C9HN4O	11.31	0.78	9	1	4	182	C11H8N3	13.16	0.8	11	8	3
181	C10H13O3	11.13	1.16	10	13	0	182	C12H22O	13.36	1.02	12	22	0
181	C10H15NO2	11.51	1	10	15	1	182	C12H6O2	13.14	0.19	12	6	0
181	C10H16N2O	11.88	0.85	10	17	2	182	C12H24N	13.73	0.87	12	24	1
181	C10HN2O2	11.66	1.02	10	1	2	182	C12H8NO	13.52	1.04	12	8	1
181	C10H19O3	12.25	0.69	10	19	0	182	C12H10N2	13.89	0.89	12	10	2
181	C10H3N3O	12.04	0.86	10	3	3	182	C13H26	14.46	0.97	13	26	0
181	C10H5N4	12.41	0.71	10	5	4	182	C13H10O	14.25	1.14	13	10	0
181	C11H17O2	12.24	1.09	11	17	0	182	C13H12N	14.62	0.99	13	12	1
181	C11HO3	12.02	1.26	11	1	0	182	C14H14	15.35	1.1	14	14	0
181	C11H19NO	12.61	0.93	11	19	1	182	C14N	15.51	1.12	14	0	1
181	C11H3NO2	12.39	1.1	11	3	1	182	C15H2	16.24	1.23	15	2	0
181	C11H21N2	12.99	0.78	11	21	2							
181	C11H5N2O	12.77	0.95	11	5	2	183	C7H7N2O4	8.6	1.13	7	7	2
181	C11H7N3	13.14	0.8	11	7	3	183	C7H9N3O3	8.97	0.96	7	9	3
181	C12H21O	13.34	1.02	12	21	0	183	C7H11N4O2	9.34	0.79	7	11	4
181	C12H5O2	13.13	1.19	12	5	0	183	C8H9NO4	9.33	1.19	8	9	1
181	C12H23N	13.72	0.87	12	23	1	183	C8H11N2O3	9.7	1.02	8	11	2
181	C12H7NO	13.5	1.04	12	7	1	183	C8H13N3O2	10.08	0.86	8	13	3
181	C12H9N2	13.87	0.89	12	9	2	183	C8H15N4O	10.45	0.7	8	15	4
181	C13H25	14.45	0.97	13	25	0	183	C9H11O4	10.06	1.26	9	11	0
181	C13H9O	14.23	1.14	13	9	0	183	C9H13NO3	10.43	1.09	9	13	1
181	C13H11N	14.61	0.99	13	11	1	183	C9H15N2O2	10.81	0.93	9	15	2
181	C14H13	15.34	1.09	14	13	0	183	C9H17N3O	11.18	0.77	9	17	3
181	C15H	16.22	1.23	15	1	0	183	C9H23O2	10.76	0.95	9	23	0
							183	C9H19N4	11.56	0.61	9	19	4
182	C7H6N2O4	8.58	1.13	7	6	2	183	C9H3N4O	11.34	0.79	9	3	4
182	C7H8N3O3	8.95	0.96	7	8	3	183	C10H15O3	11.16	1.17	10	15	0
182	C7H10N4O2	9.33	0.79	7	10	4	183	C10H17NO2	11.54	1.01	10	17	1
182	C8H8NO4	9.31	1.19	8	8	1	183	C10HNO3	11.32	1.18	10	1	1
182	C8H10N2O3	9.69	1.02	8	10	2	183	C10H19N2O	11.91	0.85	10	19	2
182	C8H12N3O2	10.06	0.86	8	12	3	183	C10H3N2O2	11.7	1.02	10	3	2

183	C10H21N3	12.29	0.69	10	21	3	184	C12H24O	13.39	1.03	12	24	0
183	C10H5N3O	12.07	0.87	10	5	3	184	C12H8O2	13.17	1.2	12	8	0
183	C10H7N4	12.44	0.71	10	7	4	184	C12H26N	13.76	0.88	12	26	1
183	C11H19O2	12.27	1.09	11	19	0	184	C12H10NO	13.55	1.05	12	10	1
183	C11H3O3	12.05	1.26	11	3	0	184	C12H12N2	13.92	0.9	12	12	2
183	C11H21NO	12.64	0.93	11	21	1	184	C13H28	14.5	0.97	13	28	0
183	C11H5NO2	12.43	1.11	11	5	1	184	C13H12O	14.28	1.14	13	12	0
183	C11H23N2	13.02	0.78	11	23	2	184	C13H14N	14.65	1	13	14	1
183	C11H7N2O	12.8	0.95	11	7	2	184	C13N2	14.81	1.02	13	0	2
183	C11H9N3	13.17	0.8	11	9	3	184	C14H16	15.38	1.1	14	16	0
183	C12H23O	13.37	1.02	12	23	0	184	C14O	15.17	1.27	14	0	0
183	C12H7O2	13.16	1.2	12	7	0	184	C14H2N	15.54	1.13	14	2	1
183	C12H25N	13.75	0.87	12	25	1	184	C15H4	16.27	124	15	4	0
183	C12H9NO	13.53	1.05	12	9	1							
183	C12H11N2	13.91	0.9	12	11	2	185	C7H9N2O4	8.63	1.13	7	9	2
183	C13H27	14.48	0.97	13	27	0	185	C7H11N3O3	9	0.96	7	11	3
183	C13H11O	14.29	1.14	13	11	0	185	C7H13N4O2	9.38	0.8	7	13	4
183	C13H13N	14.64	0.99	13	13	1	185	C8H11NO4	9.36	1.19	8	11	1
183	C14H15	15.37	1.1	14	15	0	185	C8H13N2O3	9.73	1.03	8	13	2
183	C14HN	15.53	1.12	14	1	1	185	C8H15N3O2	10.11	0.86	8	15	3
183	C15H3	16.26	1.23	15	3	0	185	C8H17N4O	10.48	0.7	8	17	4
							185	C8HN4O2	10.26	0.88	8	1	4
184	C7H8N2O4	8.61	1.13	7	8	2	185	C9H13O4	100.09	1.26	9	13	0
184	C7H10N3O3	8.99	0.96	7	10	3	185	C9H15NO3	10.46	1.1	9	15	1
184	C7H12N4O2	9.36	0.8	7	12	4	185	C9H17N2O2	10.84	0.93	9	17	2
184	C8H10NO4	9.34	1.19	8	10	1	185	C9HN2O3	10.62	1.11	9	1	2
184	C8H12N2O3	9.72	1.03	8	12	2	185	C9H19N3O	11.21	0.77	9	19	3
184	C8H14N3O2	10.09	0.86	8	14	3	185	C9H3N3O2	11	0.95	9	3	3
184	C8H16N4O	10.47	0.7	8	16	4	185	C9H21N4	11.59	0.62	9	21	4
184	C8N4O2	10.25	0.88	8	0	4	185	C9H5N4O	11.37	0.79	9	5	4
184	C9H12O4	10.07	1.26	9	12	0	185	C10H17O3	11.2	1.17	10	17	0
184	C9H14NO3	10.45	1.09	9	14	1	185	C10HO4	10.98	1.35	10	1	0
184	C9H16N2O2	10.82	0.93	9	16	2	185	C10H19NO2	11.57	1.01	10	19	1
184	C9N2O3	10.61	1.11	9	0	2	185	C10H3NO3	11.35	1.19	10	3	1
184	C9H18N3O	11.2	0.77	9	18	3	185	C10H21N2O	11.94	0.85	10	21	2
184	C9H2N3O2	10.98	0.95	9	2	3	185	C10H5N2O2	11.73	1.03	10	5	2
184	C9H20N4	11.57	0.61	9	20	4	185	C10H23N3	12.32	0.7	10	23	3
184	C9H4N4O	11.35	0.79	9	4	4	185	C10H7N3O	12.1	0.87	10	7	3
184	C10H16O3	11.18	1.17	10	16	0	185	C10H9N4	12.48	0.72	10	9	4
184	C10O4	10.96	1.34	10	0	0	185	C11H21O2	12.3	1.09	11	21	0
184	C10H18NO2	11.55	1.01	10	18	1	185	C11H5O3	12.08	1.27	11	5	0
184	C10H2NO3	11.34	1.18	10	2	1	185	C11H23NO	12.68	0.94	11	23	1
184	C10H20N2O	11.93	0.85	10	20	2	185	C11H7NO2	12.46	1.11	11	7	1
184	C10H4N2O2	11.71	1.03	10	4	2	185	C11H25N2	13.05	0.79	11	25	2
184	C10H22N3	12.3	0.7	10	22	3	185	C11H9N2O	12.83	0.96	11	9	2
184	C10H6N3O	12.09	0.87	10	6	3	185	C11H11N3	13.21	0.81	11	11	3
184	C10H8N4	12.46	0.71	10	8	4	185	C12H25O	13.41	1.03	12	25	0
184	C11H20O2	12.28	1.09	11	20	2	185	C12H9O2	13.19	1.2	12	9	0
184	C11H4O3	12.07	1.27	11	4	0	185	C12H27N	13.78	0.88	12	27	1
184	C11H22NO	12.66	0.94	11	22	1	185	C12H11NO	13.56	1.05	12	11	1
184	C11H6NO2	12.44	1.11	11	6	1	185	C12H13N2	13.94	0.9	12	13	2
184	C11H24N2	13.03	0.78	11	24	2	185	C13H13O	14.29	1.15	13	13	0
184	C11H8N2O	12.82	0.96	11	8	2	185	C13H15N	14.67	1	13	15	1
184	C11H10N3	13.19	0.8	11	10	3	185	C13HN2	14.83	1.02	13	1	2

185	C14NH17	15.4	1.1	14	17	0	187	C7H13N3O3	9.03	0.97	7	13	3
185	C14HO	15.18	1.27	14	1	0	187	C7H15N4O2	9.41	0.8	7	15	4
185	C14H3N	15.56	1.13	14	3	1	187	C8H13NO4	9.39	1.2	8	13	1
185	C15H5	16.29	1.24	15	5	0	187	C8H15N2O3	9.77	1.03	8	15	2
							187	C8H17N3O2	10.14	0.87	8	17	3
186	C7H10N2O4	8.64	1.13	7	10	2	187	C8HN3O3	9.92	1.04	8	1	3
186	C7H12N3O3	9.02	0.96	7	12	3	187	C8H19N4O	10.51	0.7	8	19	4
186	C7H14N4O2	9.39	0.8	7	14	4	187	C8H3N4O2	10.3	0.88	8	3	4
186	C8H12NO4	9.37	1.19	8	12	1	187	C9H15O4	10.12	1.26	9	15	0
186	C8H14N2O3	9.75	1.03	8	14	2	187	C9H17NO3	10.5	1.1	9	17	1
186	C8H16N3O2	10.12	0.86	8	16	3	187	C9HNO4	10.28	1.28	9	1	1
186	C8N3O3	9.91	1.04	8	0	3	187	C9H19N2O2	10.87	0.94	9	19	2
186	C8H18N4O	10.5	0.7	8	18	4	187	C9H3N3O3	10.65	1.21	9	3	3
186	C8H2N4O2	10.28	0.88	8	2	4	187	C9H21N3O	11.24	0.78	9	21	3
186	C9H14O4	10.11	1.26	9	14	0	187	C9H5N3O2	11.03	0.95	9	5	3
186	C9H16NO3	10.48	1.1	9	16	1	187	C9H23N4	11.62	0.62	9	23	4
186	C9NO4	10.26	1.28	9	0	1	187	C9H7N4O	11.4	0.8	9	7	4
186	C9H18N2O2	10.85	0.94	9	18	2	187	C10H19O3	11.23	1.17	10	19	0
186	C9H2N2O3	10.64	1.11	9	2	2	187	C10H3O4	11.01	1.35	10	3	0
186	C9H20N3O	11.23	0.78	9	20	3	187	C10H21NO2	11.6	1.01	10	21	1
186	C9H4N3O2	11.01	0.95	9	4	3	187	C10H5NO3	11.38	1.19	10	5	1
186	C9H22N4	11.6	0.62	9	22	4	187	C10H23N2O	11.98	0.86	10	23	2
186	C9H6N4O	11.39	0.79	9	6	4	187	C10H7N2O2	11.76	1.03	10	7	2
186	C10H18O3	11.21	1.17	10	18	0	187	C10H25N3	12.35	0.7	10	25	3
186	C10H2O4	10.99	1.35	10	2	0	187	C10H9N3O	12.13	0.88	10	9	3
186	C10H20NO2	11.59	1.01	10	20	1	187	C10H11N4	12.51	0.72	10	11	4
186	C10H4NO3	11.37	1.19	10	4	1	187	C10H23O2	12.33	1.1	10	23	0
186	C10H22N2O	11.96	0.86	10	22	2	187	C10H7O3	12.12	1.27	10	7	0
186	C10H6N2O2	11.74	1.03	10	6	2	187	C11H25NO	12.71	0.94	11	25	1
186	C10H24N3	12.33	0.7	10	24	3	187	C11H9NO2	12.49	1.12	11	9	1
186	C10H8N3O	12.12	0.87	10	8	3	187	C11H11N2O	12.86	0.96	11	11	2
186	C10H10N4	12.49	0.72	10	10	4	187	C11H13N3	13.24	0.81	11	13	3
186	C11H22O2	12.32	1.1	11	22	0	187	C12H11O2	13.22	1.2	12	11	0
186	C11H6O3	12.1	1.27	11	6	0	187	C12H13NO	13.6	1.05	12	13	1
186	C11H24NO	12.69	0.94	11	24	1	187	C12H15N2	13.97	0.9	12	15	2
186	C11H8NO2	12.47	1.11	11	8	1	187	C12HN3	14.13	0.93	12	1	3
186	C11H26N2	13.07	0.79	11	26	2	187	C13H15O	14.33	1.15	13	15	0
186	C11H10N2O	12.85	0.96	11	10	2	187	C13H17N	14.7	1	13	17	1
186	C11H12N3	13.22	0.81	11	12	3	187	C13HNO	14.48	1.17	13	1	1
186	C12H26O	13.42	1.03	12	26	0	187	C13H3N2	14.86	1.03	13	3	2
186	C12H10O2	13.21	1.2	12	10	0	187	C14H19	15.43	1.11	14	19	0
186	C12H12NO	13.58	1.05	12	12	1	187	C14H3O	15.22	1.28	14	3	0
186	C12H14N2	13.95	0.9	12	14	2	187	C14H5N	15.59	1.13	14	5	1
186	C12N3	14.11	0.92	12	0	3	187	C15H7	16.32	1.24	15	7	0
186	C13H14O	14.31	1.15	13	14	0							
186	C13H16N	14.69	1	13	16	1	188	C7H12N2O4	8.68	1.14	7	12	2
186	C13NO	14.47	1.17	13	0	1	188	C7H14N3O3	9.05	0.97	7	14	3
186	C13H2N2	14.84	1.02	13	2	2	188	C7H16N4O2	9.42	0.8	7	16	4
186	C14H18	15.42	1.11	14	18	0	188	C8H14NO4	9.41	1.2	8	14	1
186	C14H2O	15.2	1.27	14	2	0	188	C8H16N2O3	9.78	1.03	8	16	2
186	C14H4N	15.57	1.13	14	4	1	188	C8N2O4	9.56	1.21	8	0	2
186	C15H6	16.3	1.24	15	6	0	188	C8H18N3O2	10.16	0.87	8	18	3
							188	C8H2N3O3	9.94	1.05	8	2	3
187	C7H11N2O4	8.66	1.13	7	11	2	188	C8H20N4O	10.53	0.71	8	20	4



188	C8H4N4O2	10.31	0.88	8	4	4	189	C9H23N3O	11.28	0.78	9	23	3
188	C9H16O4	10.14	1.26	9	16	0	189	C9H7N3O2	11.06	0.96	9	7	3
188	C9H18NO3	10.51	1.1	9	18	1	189	C9H9N4O	11.43	0.8	9	9	4
188	C9H2NO4	10.3	1.28	9	2	1	189	C10H21O3	11.26	1.18	10	21	0
188	C9H20N2O2	10.89	0.94	9	20	2	189	C10H5O4	11.04	1.35	10	5	0
188	C9H4N2O3	10.67	1.12	9	4	2	189	C10H23NO2	11.63	1.02	10	23	1
188	C9H22N3O	11.26	0.78	9	22	3	189	C10H7NO3	11.42	1.19	10	7	1
188	C9H6N3O2	11.04	0.96	9	6	3	189	C10H9N2O2	11.79	1.04	10	9	2
188	C9H24N4	11.64	0.62	9	24	4	189	C10H11N3O	12.17	0.88	10	11	3
188	C9H8N4O	11.42	0.8	9	8	4	189	C10H13N4	12.54	0.72	10	13	4
188	C10H20O3	11.24	1.18	10	29	0	189	C11H9O3	12.15	1.28	11	9	0
188	C10H4O4	11.03	1.35	10	4	0	189	C11H11NO2	12.52	1.12	11	11	1
188	C10H22NO2	11.62	1.02	10	22	1	189	C11H13N2O	12.9	0.97	11	13	2
188	C10H6NO3	11.4	1.19	10	6	1	189	C11H15N3	13.27	0.81	11	15	3
188	C10H24N2O	11.99	0.86	10	24	2	189	C11HN4	13.43	0.83	11	1	4
188	C10H8N2O2	11.72	1.03	10	8	2	189	C12H13O2	13.25	1.21	12	13	0
188	C10H10N3O	12.15	0.88	10	10	3	189	C12H15NO	13.63	1.06	12	15	1
188	C10H12N4	12.52	0.72	10	12	4	189	C12H17N2	14	0.91	12	17	2
188	C11H24O2	12.35	0.1	11	24	0	189	C12HN2O	13.79	1.08	12	1	2
188	C11H8O3	12.13	1.27	11	8	0	189	C12H3N3	14.16	0.93	12	3	3
188	C11H10NO2	12.51	1.12	11	10	1	189	C13H17O	14.36	1.16	13	17	0
188	C11H12N2O	12.88	0.96	11	12	2	189	C13HO2	14.14	1.33	13	1	0
188	C11H14N3	13.25	0.81	11	14	3	189	C13H19N	14.73	1.01	13	19	1
188	C11N4	13.4	0.83	11	0	4	189	C13H3NO	14.52	1.18	13	3	1
188	C12H12O2	13.24	1.21	12	12	0	189	C13H5N2	14.89	1.03	13	5	2
188	C12H14NO	13.61	1.06	12	14	1	189	C14H21	15.46	1.11	14	21	0
188	C12H16N2	13.99	0.91	12	16	2	189	C14H5O	15.25	1.28	14	5	1
188	C12N2O	13.77	1.08	12	0	2	189	C14H7N	15.62	1.14	14	7	1
188	C12H2N3	14.14	0.93	12	2	3	189	C15H9	16.35	1.25	15	9	0
188	C13H16O	14.34	1.15	13	1	6							
188	C13O2	14.13	1.32	13	16	0	190	C7H14N2O4	8.71	1.14	7	14	2
188	C13H18N	14.72	1.01	13	18	1	190	C7H16N3O3	9.08	0.97	7	16	3
188	C13H2NO	14.5	1.18	13	2	1	190	C7H18N4O2	9.46	0.8	7	18	4
188	C13H4N2	14.87	1.03	13	4	2	190	C8H16NO4	9.44	1.2	8	16	1
188	C14N2O	15.45	1.11	14	20	0	190	C8H18N2O3	9.81	1.03	8	18	2
188	C14H4O	15.23	1.28	14	4	0	190	C8H2N2O4	9.6	1.21	8	2	2
188	C14H6N	15.61	1.14	14	6	1	190	C8H20N3O2	10.19	0.87	8	20	3
188	C15H8	16.34	1.25	15	8	0	190	C8H4N3O3	9.97	1.05	8	4	3
							190	C8H22N4O	10.56	0.71	8	22	4
189	C7H13N2O4	8.69	1.14	7	13	2	190	C8H6N4O2	10.34	0.89	8	6	4
189	C7H15N3O3	9.07	0.97	7	15	3	190	C9H18O4	10.17	1.27	9	18	0
189	C7H17N4O2	9.44	0.8	7	17	4	190	C9H20NO3	10.54	1.1	9	20	1
189	C8H15NO4	9.42	1.2	8	15	1	190	C9H4NO4	10.33	1.28	9	4	1
189	C8H17N2O3	9.8	1.03	8	17	2	190	C9H22N2O2	10.92	0.94	9	22	1
189	C8HN2O4	9.58	1.21	8	1	2	190	C9H6N2O3	10.7	1.12	9	6	2
189	C8H19N3O2	10.17	0.87	8	19	3	190	C9H8N3O2	11.08	0.96	9	8	3
189	C8H3N3O3	9.95	1.05	8	3	3	190	C9H10N4O	11.45	0.8	9	10	4
189	C8H21N4O	10.55	0.71	8	21	4	190	C10H22O3	11.28	1.18	10	22	0
189	C8H5N4O2	10.33	0.88	8	5	4	190	C10H6O4	11.06	1.35	10	6	0
189	C9H17O4	10.15	1.26	9	17	0	190	C10H8NO3	11.43	1.2	10	8	1
189	C9H19NO3	10.53	1.1	9	19	1	190	C10H10N2O2	11.81	1.04	10	10	2
189	C9H3NO4	10.31	1.28	9	3	1	190	C10H12N3O	12.18	0.88	10	12	3
189	C9H21N2O2	10.9	0.94	9	21	2	190	C10H14N4	12.56	0.73	10	14	4
189	C9H5N2O3	10.69	1.12	9	5	2	190	C11H10O3	12.16	1.28	11	10	0

190	C11H12NO2	12.54	1.12	11	12	1	191	C13H3O2	14.17	1.33	13	3	0
190	C11H14NO2	12.91	0.97	11	14	1	191	C13H21N	14.77	1.01	13	21	1
190	C11H16N3	13.29	0.82	11	16	3	191	C13H5NO	14.55	1.18	13	5	1
190	C11N3O	13.07	0.99	11	0	3	191	C13H7N2	14.92	1.04	13	7	2
190	C11H2N4	13.44	0.84	11	2	4	191	C14H23	15.5	1.12	14	23	0
190	C12H14O2	13.27	1.21	12	14	0	191	C14H7O	15.28	1.29	14	7	0
190	C12H16NO	13.64	1.06	12	16	1	191	C14H9N	15.65	1.14	14	9	1
190	C12NO2	13.43	1.23	12	0	1	191	C15H11	16.39	1.25	15	11	0
190	C12H18N2	14.02	0.91	12	18	2							
190	C12H2N2O	13.8	1.08	12	2	2	192	C7H16N2O4	8.74	1.14	7	16	2
190	C12H4N3	14.13	0.93	12	4	3	192	C7H18N3O3	9.11	0.97	7	18	3
190	C13H18O	14.37	1.16	13	18	0	192	C7H20N4O2	9.49	0.81	7	20	4
190	C13H2O2	14.16	1.33	13	2	0	192	C8H18NO4	9.47	1.2	8	18	1
190	C13H20N	14.75	1.01	13	20	1	192	C8H20N2O3	9.85	1.04	8	20	2
190	C13H4NO	14.53	1.18	13	4	1	192	C8H4N2O4	9.63	1.22	8	4	2
190	C13H6N2	14.91	1.03	13	6	2	192	C8H6N3O3	10	1.05	8	6	3
190	C14H22	15.48	1.12	14	22	0	192	C8H8N4O2	10.38	0.89	8	8	4
190	C14H6O	15.26	1.28	14	6	0	192	C9H20O4	10.2	1.27	9	20	0
190	C14H8N	15.64	1.14	14	8	1	192	C9H6NO4	10.36	1.29	9	6	1
190	C15H10	16.37	1.25	15	10	0	192	C9H8N2O3	10.73	1.12	9	8	2
							192	C9H10N3O2	11.11	0.96	9	10	3
191	C7H15N2O4	8.72	1.14	7	15	2	192	C9H12N4O	11.48	0.8	9	12	4
191	C7H17N3O3	9.1	0.97	7	17	3	192	C10H8O4	11.09	1.36	10	8	0
191	C7H19N4O2	9.47	0.81	7	19	4	192	C10H10NO3	11.46	1.2	10	10	1
191	C8H17NO4	9.45	1.2	8	17	1	192	C10H12N2O2	11.84	1.04	10	12	2
191	C8H10N2O3	9.83	1.04	8	10	2	192	C10H14N3O	12.21	0.89	10	14	3
191	C8H3N2O4	9.61	1.22	8	3	2	192	C10H16N4	12.95	0.73	10	16	4
191	C8H21N3O2	10.2	0.87	8	21	3	192	C10N4O	12.37	0.9	10	0	4
191	C8H65N3O3	9.99	1.05	8	5	3	192	C11H12O3	12.2	1.28	11	12	3
191	C8H7N4O2	10.36	0.89	8	7	4	192	C11H14NO2	12.57	1.13	11	14	1
191	C9H19O4	10.19	1.27	9	19	0	192	C11H16N2O	12.94	0.97	11	16	2
191	C9H21NO3	10.56	1.11	9	21	1	192	C11N2O2	12.73	1.15	11	0	2
191	C9H5NO4	10.34	1.28	9	5	1	192	C11H18N3	13.32	0.82	11	18	3
191	C9H7N2O3	10.72	1.12	9	7	2	192	C11H2N3O	13.1	0.99	11	2	3
191	C9H9N3O2	11.09	0.96	9	9	3	192	C11H4N4	13.48	0.84	11	4	4
191	C9H11N4O	11.47	0.8	9	11	4	192	C12H16O2	13.3	1.22	12	16	0
191	C10H7O4	11.07	1.36	10	7	0	192	C12O3	13.08	1.39	12	0	0
191	C10H9NO3	11.45	1.2	10	9	1	192	C12H18NO	13.68	1.06	12	18	1
191	C10H11N2O2	11.82	1.04	10	11	2	192	C12H2NO2	13.46	1.24	12	2	2
191	C10H13N3O	12.2	0.88	10	13	3	192	C12H20N2	14.05	0.92	12	20	2
191	C10H15N4	12.57	0.73	10	15	4	192	C12H4N2O	13.83	1.09	12	4	2
191	C11H11O3	12.18	1.28	11	11	0	192	C12H6N3	14.21	0.94	12	6	3
191	C11H13NO2	12.55	1.12	11	13	1	192	C13H20O	14.41	1.16	13	20	0
191	C11H15N2O	12.93	0.97	11	15	2	192	C13H4O2	14.19	1.33	13	4	0
191	C11H17N3	13.3	0.82	11	17	3	192	C13H22N	14.78	1.02	13	22	1
191	C11HN3O	13.09	0.99	11	1	3	192	C13H6NO	14.56	1.18	13	6	1
191	C11H3N4	13.46	0.84	11	3	4	192	C13H8N2	14.94	1.04	13	8	2
191	C12H15O2	13.29	1.21	12	15	0	192	C14H24	15.51	1.12	14	24	0
191	C12H17NO	13.66	1.06	12	17	1	192	C14H8O	15.3	1.29	14	8	0
191	C12HNO2	13.44	1.23	12	1	1	192	C14H10N	15.67	1.15	14	10	1
191	C12H19N2	14.03	0.91	12	19	2	192	C15H12	16.4	1.26	15	12	0
191	C12H3N2O	13.82	1.08	12	3	2	192	C16	17.29	1.4	16	0	0
191	C12H5N3	14.19	0.93	12	5	3							
191	C13H19O	14.39	1.16	13	19	0	193	C7H17N2O4	8.76	1.14	7	7	2

193	C7H19N3O3	9.13	0.98	7	19	3	194	C10H2N4O	12.4	0.73	10	2	4
193	C8H19NO4	9.49	1.2	8	19	1	194	C11H14O3	12.23	0.91	11	14	0
193	C8H5N2O4	9.64	1.22	8	5	2	194	C11H16NO2	12.6	1.28	11	16	1
193	C8H7N3O3	10.02	1.05	8	7	3	194	C11NO3	12.39	1.13	11	0	1
193	C8H9N4O2	10.39	0.89	8	9	4	194	C11H18N2O	12.98	0.98	11	18	2
193	C9H7NO4	10.38	1.29	9	7	1	194	C11H2N2O2	12.76	1.15	11	2	2
193	C9H9N2O3	10.75	1.13	9	9	2	194	C11H20N3	13.35	0.82	11	20	3
193	C9H11N3O2	11.12	0.96	9	11	3	194	C11H4N3O	13.13	1	11	4	3
193	C9H13N4O	11.5	0.81	9	13	4	194	C11H6N4	13.51	0.85	11	6	4
193	C10H9O4	11.11	1.36	10	9	0	194	C12H18O2	13.33	1.22	12	18	0
193	C10H11O3	11.48	1.2	10	11	0	194	C12H2O3	13.12	1.39	12	2	0
193	C10H13N2O2	11.86	1.04	10	13	2	194	C12H20NO	13.71	1.07	12	20	1
193	C10H15N3O	12.23	0.89	10	15	3	194	C12H4NO2	13.49	1.24	12	4	1
193	C10H17N4	12.6	0.73	10	17	4	194	C12H22N2	14.08	0.92	12	22	2
193	C10HN4O	12.39	0.91	10	1	4	194	C12H6N2O	13.87	1.09	12	6	2
193	C11H13O3	12.21	1.28	11	13	0	194	C12H8N3	14.24	0.94	12	8	3
193	C11H15NO2	12.59	1.13	11	15	1	194	C13H22O	14.44	1.17	13	22	0
193	C11H17N2O	12.96	0.97	11	17	2	194	C13H6O2	14.22	1.34	13	6	0
193	C11HN2O2	12.74	1.15	11	1	2	194	C13H24N	14.81	1.02	13	24	1
193	C11H19N3	13.34	0.82	11	19	3	194	C13H8NO	14.6	1.19	13	8	1
193	C11H3N3O	13.12	0.99	11	3	3	194	C13H10N2	14.97	1.04	13	10	2
193	C11H5N4	13.49	0.84	11	5	4	194	C14H26	15.54	1.13	14	26	0
193	C12H17O2	13.32	1.22	12	17	0	194	C14H10O	15.33	1.29	14	10	0
193	C12HO3	13.1	1.39	12	1	0	194	C14H12N	15.7	1.15	14	12	1
193	C12H19NO	13.69	1.07	12	19	1	194	C15H14	16.43	1.26	15	14	0
193	C12H3NO2	13.47	1.24	12	3	1	194	C15N	16.59	1.29	15	0	1
193	C12H21N2	14.07	0.92	12	21	2	194	C16H2	17.32	1.41	16	2	0
193	C12H5N2O	13.85	1.09	12	5	2							
193	C12H7N3	14.22	0.94	12	7	3	195	C8H7N2O4	9.68	1.22	8	7	2
193	C13H21O	14.42	1.16	13	21	0	195	C8H9N3O3	10.05	1.06	8	9	3
193	C13H5O2	14.21	1.33	13	5	0	195	C8H11N4O2	10.42	0.89	8	11	4
193	C13H23N	14.8	1.02	13	23	1	195	C9H9NO4	10.41	1.29	9	9	1
193	C13H7NO	14.58	1.19	13	7	1	195	C9H11N2O3	10.78	1.13	9	11	2
193	C13H9N2	14.95	1.04	13	9	2	195	C9H13N3O2	11.16	0.97	9	13	3
193	C14H25	15.53	1.12	14	25	0	195	C9H15N4O	11.53	0.81	9	15	4
193	C14H9O	15.31	1.29	14	9	0	195	C10H11O4	11.14	1.36	10	11	0
193	C14H11N	15.69	1.15	14	11	1	195	C10H13NO3	11.51	1.21	10	13	1
193	C15H13	16.42	1.26	15	13	0	195	C10H15N2O2	11.89	1.05	10	15	2
193	C16H	17.31	1.4	16	1	0	195	C10H17N3O	12.26	0.89	10	17	3
							195	C10HN3O2	12.04	1.07	10	1	3
194	C7H18N2O4	8.77	1.14	7	18	2	195	C10H19N4	12.64	0.74	10	19	4
194	C8H6N2O4	9.66	1.22	8	6	2	195	C10H3N4O	12.42	0.91	10	3	4
194	C8H8N3O3	10.03	1.06	8	8	3	195	C11H15O3	12.24	1.29	11	15	0
194	C8H10N4O2	10.41	0.89	8	10	4	195	C11H17NO2	12.62	1.13	11	17	1
194	C9H8NO4	10.39	1.29	9	8	1	195	C11HNO3	12.4	1.31	11	1	1
194	C9H10N2O2	10.77	1.13	9	10	2	195	C11H19N2O	12.99	0.98	11	19	2
194	C9H12N3O2	11.14	1.3	9	12	3	195	C11H3N2O2	12.78	1.15	11	3	2
194	C9H14N4O	11.51	0.97	9	14	4	195	C11H21N3	13.37	0.83	11	21	3
194	C10H10O4	11.12	0.81	10	10	0	195	C11H5N3O	13.15	1	11	5	3
194	C10H12NO3	11.5	1.36	10	12	1	195	C11H7N4	13.52	0.85	11	7	4
194	C10H14N2O2	11.87	1.2	10	14	2	195	C12H19O2	13.25	1.22	12	19	0
194	C10H16N3O	12.25	1.05	10	16	3	195	C12H3O3	13.13	1.39	12	3	0
194	C10N3O2	12.03	0.89	10	0	3	195	C12H21NO	13.72	1.07	12	21	1
194	C10H18N4	12.62	1.06	10	18	4	195	C12H5NO	13.51	1.24	12	5	1

195	C12H23N2	14.1	0.92	12	23	2	196	C14H14N	15.73	1.16	14	14	1
195	C12H7N2O	13.88	1.09	12	7	2	196	C14N2	15.89	1.18	14	0	2
195	C12H9N3	14.26	0.94	12	9	3	196	C15H16	16.47	1.27	15	16	0
195	C13H23O	14.45	1.17	13	23	0	196	C15O	16.25	1.43	15	0	0
195	C13H7O2	14.24	1.34	13	7	0	196	C15H2N	16.62	1.29	15	2	0
195	C13H25N	14.83	1.02	13	25	1	196	C16H4	17.35	1.41	16	4	0
195	C13H9NO	14.61	1.19	13	9	1							
195	C13H11N2	14.99	1.05	13	11	2	197	C8H9N2O4	9.71	1.22	8	9	2
195	C14H27	15.56	1.13	14	27	0	197	C8H11N3O3	10.08	1.06	8	11	3
195	C14H11O	15.34	1.3	14	11	0	197	C8H13N4O2	10.46	0.9	8	13	4
195	C14H13N	15.72	1.15	14	13	1	197	C9H11NO4	10.44	1.29	9	11	1
195	C15H15	16.45	1.27	15	15	0	197	C9H13N2O3	10.81	1.13	9	13	2
195	C15HN	16.61	1.29	15	1	1	197	C9H15N3O2	11.19	0.97	9	15	3
195	C16H3	17.34	1.41	16	3	0	197	C9H17N4O	11.56	0.81	9	17	4
							197	C9HN4O2	11.35	0.99	9	1	4
196	C8H8N2O4	9.69	1.22	8	8	2	197	C10H13O4	11.17	1.37	10	13	0
196	C8H10N3O3	10.07	1.06	8	10	3	197	C10H15NO3	11.54	1.21	10	15	1
196	C8H12N4O2	10.44	0.96	8	12	4	197	C10H17N2O2	11.92	1.05	10	17	2
196	C9H10NO4	10.42	1.29	9	10	1	197	C10HN2O3	11.7	1.23	10	1	2
196	C9H12N2O3	10.8	1.13	9	12	2	197	C10H19N3O	12.29	0.9	10	19	3
196	C9H14N3O2	11.17	0.97	9	14	3	197	C10H3N3O2	12.08	1.07	10	3	3
196	C9H16N4O2	11.55	0.81	9	16	4	197	C10H21N4	12.67	0.74	10	21	4
196	C9N4O2	11.33	0.99	9	0	4	197	C10H5N4O	12.45	0.91	10	5	4
196	C10H12O4	11.15	1.37	10	12	0	197	C11H17O3	12.28	1.29	11	17	0
196	C10H14NO3	11.53	1.21	10	14	1	197	C11HO4	12.06	1.46	11	1	0
196	C10H16N2O2	11.9	1.05	10	16	2	197	C11H19NO2	12.65	1.14	11	19	1
196	C10N2O3	11.69	1.22	10	0	2	197	C11H3NO3	12.43	1.31	11	3	1
196	C10H18N3O	12.28	0.89	10	18	3	197	C11H21N2O	13.02	0.98	11	21	2
196	C10H2N3O2	12.06	1.07	10	2	3	197	C11H5N2O2	12.81	1.16	11	5	2
196	C10H20N4	12.65	0.74	10	20	4	197	C11H23N3	13.4	0.83	11	23	3
196	C10H4N4O	12.43	0.91	10	4	4	197	C11H7N3O	13.18	1	1	7	3
196	C11H16O3	12.26	1.29	11	16	0	197	C11H9N4	13.56	0.85	11	9	4
196	C11O4	12.04	1.46	11	0	0	197	C12H21O2	13.38	1.23	12	21	0
196	C11H18NO2	12.63	1.13	11	18	1	197	C12H5O3	13.16	1.4	12	5	0
196	C11H2NO3	12.42	1.31	11	2	1	197	C12H23NO	13.76	1.08	12	23	1
196	C11H20N2O	13.01	0.98	11	20	2	197	C12H7NO2	13.54	1.25	12	7	1
196	C11H4N2O2	12.79	1.15	11	4	2	197	C12H25N2	14.13	0.93	12	25	2
196	C11H22N3	13.38	0.83	11	22	3	197	C12H9N2O	13.91	1.1	12	9	2
196	C11H6N3O	13.17	1	11	6	3	197	C12H11N3	14.29	0.95	12	11	3
196	C11H8N4	13.54	0.85	11	8	4	197	C13H25O	14.49	1.17	13	25	0
196	C12H20O2	13.37	1.22	12	20	0	197	C13H9O2	14.27	1.34	13	9	0
196	C12N4O3	13.15	1.4	12	4	0	197	C13H27N	14.86	1.03	13	27	1
196	C12H22NO	13.74	1.07	12	22	1	197	C13H11NO	14.64	1.2	13	11	1
196	C12H6NO2	13.52	1.24	12	6	1	197	C13H13N2	15.02	1.05	13	13	2
196	C12H24N2	14.11	0.92	12	24	2	197	C14H29	15.59	1.13	14	29	0
196	C12H8N2O	13.9	1.09	12	8	2	197	C14H13O	15.38	1.3	14	13	0
196	C12H10N3	14.27	0.95	12	10	3	197	C14H15N	15.75	1.16	14	15	1
196	C13H24O	14.47	1.17	13	24	0	197	C14HN2	15.91	1.18	14	1	2
196	C13H8O2	14.25	1.34	13	8	0	197	C15H17	16.48	1.27	15	17	0
196	C13H26N	14.85	1.03	13	26	1	197	C15HO	16.26	1.44	15	1	0
196	C13H10NO	14.63	1.19	13	10	1	197	C15H3N	16.64	1.3	15	3	1
196	C13H12N2	15	1.05	13	12	2	197	C16H5	17.37	1.42	16	5	0
196	C14H28	15.58	1.13	14	28	0							
196	C14H12O	15.36	1.3	14	12	0	198	C8H10N2O4	9.72	1.23	8	10	2

198	C8H12N3O3	10.1	1.06	8	12	3	199	C9H17N3O2	11.22	0.98	9	17	3
198	C8H14N4O2	10.47	0.9	8	14	4	199	C9HN3O3	11	1.15	9	1	3
198	C9H12NO4	10.46	1.3	9	12	1	199	C9H19N4O	11.59	0.82	9	19	4
198	C9H14N2O3	10.83	1.13	9	14	2	199	C9H3N4O2	11.38	0.99	9	3	4
198	C9H16N3O2	11.2	0.97	9	16	3	199	C10H15O4	11.2	1.37	10	15	0
198	C9N3O3	10.99	1.15	9	0	3	199	C10H17NO3	11.58	1.21	10	17	1
198	C9H18N4O	11.58	0.82	9	18	4	199	C10HNO4	11.36	1.39	10	1	1
198	C9H2N4O2	11.36	0.99	9	2	4	199	C10H19N2O2	11.95	1.06	10	19	2
198	C10H14O4	11.19	1.37	10	14	0	199	C10H3N2O3	11.73	1.23	10	3	2
198	C10H16NO3	11.56	1.21	10	16	1	199	C10H21N3O	12.33	0.9	10	21	3
198	C10NO4	11.34	1.39	10	0	1	199	C10H5N3O2	12.11	1.07	10	5	3
198	C10H18N2O2	11.94	1.05	10	18	2	199	C10H29N4	12.7	0.75	10	29	4
198	C10H2N2O3	11.72	1.23	10	2	2	199	C10H7N4O	12.48	0.92	10	7	4
198	C10H20N3O	12.31	0.9	10	20	3	199	C11H19O3	12.31	1.29	11	19	0
198	C10H4N3O2	12.09	1.07	10	4	3	199	C11H3O4	12.09	1.47	11	3	0
198	C10H22N4	12.68	0.74	10	22	4	199	C11H21NO2	12.68	1.14	11	21	1
198	C10H6N4O	12.47	0.92	10	6	4	199	C11H5NO3	12.74	1.31	11	5	1
198	C11H18O3	12.29	1.29	11	18	0	199	C11H23N2O	13.06	0.99	11	23	2
198	C11H2O4	12.07	1.47	11	2	0	199	C11H7N2O2	12.84	1.16	11	7	2
198	C11H20NO2	12.67	1.14	11	20	1	199	C11H25N3	13.43	0.84	11	25	3
198	C11H4NO3	12.45	1.31	11	4	1	199	C11H9N3O	13.21	1.01	11	9	3
198	C11H22N2O	13.04	0.99	11	22	2	199	C11H11N4	13.59	0.86	11	11	4
198	C11H6N2O2	12.82	1.16	11	6	2	199	C12H23O2	13.41	1.23	12	23	0
198	C11H24N3	13.42	0.83	11	24	3	199	C12H7O3	13.2	1.4	12	7	0
198	C11H8N3O	13.2	1.01	11	8	3	199	C12H25NO	13.79	1.08	12	25	1
198	C11H10N4	13.57	0.85	11	10	4	199	C12H9NO2	13.57	1.25	12	9	1
198	C12H22O2	13.4	1.23	12	22	0	199	C12H27N2	14.16	0.93	12	27	2
198	C12H6O3	13.18	1.4	12	6	0	199	C12H11N2O	13.95	1.1	12	11	2
198	C12H24NO	13.77	1.08	12	24	1	199	C12H13N3	14.32	0.95	12	13	3
198	C12H8NO2	13.55	1.25	12	8	1	199	C13H27O	14.52	1.18	13	27	0
198	C12H26N2	14.15	0.93	12	26	2	199	C13H11O2	14.3	1.35	13	11	0
198	C12H10N2O	13.93	1.1	12	10	2	199	C13H29N	14.89	1.03	13	29	1
198	C12H12N3	14.3	0.95	12	12	3	199	C13H13NO	14.68	1.2	13	13	1
198	C13H26O	14.5	1.18	13	26	0	199	C13H15N2	15.05	1.06	13	15	2
198	C13H10O2	14.29	1.35	13	10	0	199	C13HN3	15.21	1.08	13	1	3
198	C13H28N	14.88	1.03	13	28	1	199	C14H15O	15.41	1.31	14	15	0
198	C13H12NO	14.66	1.2	13	12	1	199	C14H17N	15.78	1.16	14	17	1
198	C13H14N2	15.03	1.05	13	14	2	199	C14HNO	15.56	1.33	14	1	1
198	C13N3	15.19	1.08	13	0	3	199	C14H3N2	15.94	1.19	14	3	2
198	C14H30	15.61	1.14	14	30	0	199	C15H19	16.51	1.28	15	19	0
198	C14H14O	15.39	1.3	14	14	0	199	C15H3O	16.3	1.44	15	3	0
198	C14H16N	15.77	1.16	14	16	1	199	C15H5N	16.67	1.3	15	5	1
198	C14NO	15.55	1.33	14	0	1	199	C16H7	17.4	1.42	16	7	0
198	C14H2N2	15.92	1.18	14	2	2							
198	C15H18	16.5	1.27	15	18	0	200	C8H12N2O4	9.76	1.23	8	12	2
198	C15H2O	16.28	1.44	15	2	0	200	C8H14N3O3	10.13	1.07	8	14	3
198	C15H4N	16.65	1.3	15	4	1	200	C8H16N4O2	10.5	0.9	8	16	4
198	C16H16	17.39	1.42	16	16	0	200	C9H14NO4	10.49	1.3	9	14	1
							200	C9H16N2O3	10.86	1.14	9	16	2
199	C8H11N2O4	9.74	1.23	8	11	2	200	C9N2O4	10.64	1.31	9	0	2
199	C8H13N3O3	10.11	1.06	8	13	3	200	C9H18N3O2	11.24	0.98	9	18	3
199	C8H15N4O2	10.49	0.9	8	15	4	200	C9H2N3O3	11.02	1.15	9	2	3
199	C9H13NO4	10.47	1.3	9	13	1	200	C9H20N4O	11.61	0.82	9	20	4
199	C9H15N2O3	10.85	1.14	9	15	2	200	C9H4N4O2	11.39	0.99	9	4	4

200	C10H16O4	11.22	1.37	10	16	0	201	C10H3NO4	11.39	1.39	10	3	1
200	C10H18NO3	11.59	1.21	10	18	1	201	C10H21N2O2	11.98	1.06	10	21	2
200	C10H2NO4	11.38	1.39	12	2	1	201	C10H5N2O3	11.77	1.23	10	5	2
200	C10H20N2O2	11.97	1.06	10	20	2	201	C10H23N3O	12.36	0.9	10	23	3
200	C10H4N2O3	11.75	1.23	10	4	2	201	C10H7N3O2	12.14	1.08	10	7	3
200	C10H22N3O	12.34	0.9	10	22	3	201	C10H25N4	12.73	0.75	10	25	4
200	C10H6N3O2	12.12	1.08	10	6	3	201	C10H9N4O	12.51	0.92	10	9	4
200	C10H24N4	12.72	0.75	10	24	4	201	C11H21O3	12.34	1.3	11	21	0
200	C10H8N4O	12.5	0.92	10	8	4	201	C11H5O4	12.12	1.47	11	5	0
200	C11H20O3	12.32	1.3	11	20	0	201	C11H23NO2	12.71	1.14	11	23	1
200	C11H4O4	12.11	1.47	11	4	0	201	C11H7NO3	12.5	1.32	11	7	1
200	C11H22NO2	12.7	1.14	11	22	1	201	C11H25N2O	13.09	0.99	11	25	2
200	C11H6NO3	12.48	1.32	11	6	1	201	C11H9N2O2	12.87	1.16	11	9	2
200	C11H24N2O	13.07	0.99	11	24	2	201	C11H27N3	13.46	0.84	11	27	3
200	C11H8N2O2	12.86	1.16	11	8	2	201	C11H11N3O	13.25	1.01	11	11	3
200	C11H26N3	13.45	0.84	11	26	3	201	C11H13N4	13.62	0.86	11	13	4
200	C11H10N3O	13.23	1.01	11	10	3	201	C12H25O2	13.45	1.23	12	25	0
200	C11H12N4	13.6	0.86	11	12	4	201	C12H9O3	13.23	1.41	12	9	0
200	C11H24O2	13.43	1.23	11	24	0	201	C12H27NO	13.82	1.08	12	27	0
200	C12H8O3	13.21	1.4	12	8	0	201	C12H11NO2	13.6	1.26	12	11	1
200	C12H26NO	13.8	1.08	12	26	1	201	C12H13N2O	13.98	1.11	12	13	2
200	C12H10NO2	13.59	1.25	12	10	1	201	C12H15N3	14.35	0.96	12	15	3
200	C12H28N2	14.18	0.93	12	28	2	201	C12HN4	14.51	0.98	12	1	4
200	C12H12N2O	13.96	1.1	12	12	2	201	C13H13O2	14.33	1.35	13	13	0
200	C12H14N3	14.34	0.96	12	14	3	201	C13H15NO	14.71	1.21	13	5	1
200	C12N4O3	14.49	0.98	12	0	4	201	C13H17N2	15.08	1.06	13	17	2
200	C13H28O	14.53	1.18	13	28	0	201	C13HN2O	14.87	1.23	13	1	2
200	C13H12O2	14.32	1.35	13	12	0	201	C13H3N3	15.24	1.08	1	3	3
200	C13H14NO	14.69	1.2	13	14	1	201	C14H17O	15.44	1.31	14	17	0
200	C13H16N2	15.07	1.06	13	16	2	201	C14HO2	15.22	1.48	14	1	0
200	C13N2O	14.85	1.23	13	0	2	201	C14H19N	15.81	1.17	14	19	1
200	C13H2N3	15.22	1.08	13	2	3	201	C14H3NO	15.6	1.33	14	3	1
200	C14H16O	15.42	1.31	14	16	0	201	C14H5N2	15.97	1.19	14	5	2
200	C14O2	15.21	1.48	14	0	0	201	C15H21	16.55	1.28	15	21	0
200	C14H18N	15.8	1.17	14	18	1	201	C15H5O	16.33	1.45	15	5	0
200	C14H2NO	15.58	1.33	14	2	1	201	C15H7N	16.7	1.31	15	7	1
200	C14H4N2	15.96	1.19	14	4	2	201	C16H9	17.43	1.43	16	9	0
200	C15H20	16.53	1.28	15	20	0							
200	C15H4O	16.31	1.44	15	4	0	202	C8H14N2O4	9.79	1.23	8	14	2
200	C15H6N	16.69	1.3	15	6	1	202	C8H16N3O3	10.16	1.07	8	16	3
200	C16H8	17.42	1.42	16	8	0	202	C8H18N4O2	10.54	0.91	8	18	4
							202	C9H16NO4	10.52	1.3	9	16	1
201	C8H13N2O4	9.77	1.23	8	13	2	202	C9H18N2O3	1.89	1.14	9	18	2
201	C8H15N3O3	10.15	1.07	8	15	3	202	C9H2N2O4	10.68	1.32	9	2	2
201	C8H17N4O2	10.52	0.9	8	17	4	202	C9H20N3O2	11.27	0.98	9	20	3
201	C9H15NO4	10.5	1.3	9	15	1	202	C9H4N3O3	11.05	1.16	9	4	3
201	C9H17N2O3	10.88	1.14	9	17	2	202	C9H22N4O	11.64	0.82	9	22	4
201	C9HN2O4	10.66	1.32	9	1	2	202	C9H6N4O2	11.43	1	9	6	4
201	C9H19N3O2	10.25	0.98	9	19	3	202	C10H18O4	11.25	1.38	10	18	0
201	C9H3N3O3	11.04	1.16	9	3	3	202	C10H20NO3	11.62	1.22	10	20	1
201	C9H21N4O	11.63	0.82	9	21	4	202	C10H4NO4	11.41	1.39	10	4	1
201	C9H5N4O2	11.41	1	9	5	4	202	C10H22N2O2	12	1.06	10	22	2
201	C10H17O4	11.23	1.37	10	17	0	202	C10H6N2O3	11.78	1.24	10	6	2
201	C10H19NO3	11.61	1.22	10	19	1	202	C10H24N3O	12.37	0.91	10	24	3

202	C10H8N3O2	12.16	1.08	10	8	3	203	C11H25NO2	12.75	1.15	11	25	1
202	C10H26N4	12.75	0.75	10	26	4	203	C11H9NO3	12.53	1.32	11	9	1
202	C10H10N4O	12.53	0.92	10	10	4	203	C11H11N2O2	12.9	1.17	11	11	2
202	C11H22O3	12.36	1.3	11	22	0	203	C11H13N3O	13.28	1.02	11	13	3
202	C11H6O4	12.14	1.47	11	6	0	203	C11H15N4	13.65	0.86	11	15	4
202	C11H24NO2	12.73	1.15	11	24	1	203	C12H11O3	13.26	1.41	12	11	0
202	C11H8NO3	12.51	1.32	11	8	1	203	C12H13NO2	13.63	1.26	12	13	1
202	C11H26N2O	13.1	0.99	11	26	2	203	C12H15N2O	14.01	1.11	12	15	2
202	C11H10N2O2	12.89	1.17	11	10	2	203	C12H17N3	14.38	0.96	12	17	3
202	C11H12N3O	13.26	1.01	11	12	3	203	C12HN3O	14.17	1.13	12	1	3
202	C11H14N4	13.64	0.86	11	14	4	203	C12H3N4	14.54	0.98	12	3	4
202	C12H26O2	13.46	1.24	12	26	0	203	C13H15O2	14.37	1.36	13	15	0
202	C12H10O3	13.24	1.41	12	10	0	203	C13H17NO	14.74	1.21	13	17	1
202	C12H12NO2	13.62	1.26	12	12	1	203	C13HNO2	14.52	1.38	13	1	1
202	C12H14N2O	13.99	1.11	12	14	2	203	C13H19N2	15.11	1.06	13	19	2
202	C12H16N3	14.37	0.96	12	16	3	203	C13H3N2O	14.9	1.23	13	3	2
202	C12N3O	14.15	1.13	12	0	3	203	C13H5N3	15.27	1.09	13	5	3
202	C12H2N4	14.53	0.98	12	2	4	203	C14H19O	15.47	1.32	14	19	0
202	C13H14O2	14.35	1.35	13	14	0	203	C14H3O2	15.25	1.48	14	3	0
202	C13H16NO	14.72	1.21	13	16	1	203	C14H21N	15.85	1.17	14	21	1
202	C13NO2	14.51	1.38	13	0	1	203	C14H5NO	15.63	1.34	14	5	1
202	C13H18N2	15.1	1.06	13	18	2	203	C14H7N2	16	1.2	14	7	2
202	C13H2N2O	14.88	1.23	13	2	2	203	C15H23	16.58	1.29	15	23	0
202	C13H4N3	15.26	1.09	13	4	3	203	C15H7O	16.36	1.45	15	7	0
202	C14H18O	15.46	1.31	14	18	0	203	C15H89N	16.73	1.31	15	9	1
202	C14H2O2	15.24	1.48	14	2	0	203	C16H11	17.47	1.43	16	11	0
202	C14H20N	15.83	1.17	14	20	1							
202	C14H4NO	15.61	1.34	14	4	1	204	C8H16N2O4	9.82	1.24	8	16	2
202	C14H6N2	15.99	1.19	14	6	2	204	C8H18N3O3	10.19	1.07	8	18	3
202	C15H22	16.56	1.28	15	22	0	204	C8H20N4O2	10.57	0.91	8	20	4
202	C15H6O	16.34	1.45	15	6	0	204	C9H18NO4	10.55	1.31	9	18	1
202	C15H8N	16.72	1.31	15	8	1	204	C9H20N2O3	10.93	1.14	9	20	2
202	C16H10	17.45	1.43	16	10	0	204	C9H4N2O4	10.71	1.32	9	4	2
							204	C9H22N3O2	11.3	0.98	9	22	3
203	C8H15N2O4	9.8	1.23	8	15	2	204	C9H6N3O3	11.08	1.16	9	6	3
203	C8H17N3O3	10.18	1.07	8	17	3	204	C9H24N4O	11.67	0.83	9	24	4
203	C8H19N4O2	10.55	0.91	8	19	4	204	C9H8N4O2	11.46	1	9	8	4
203	C9H17NO4	10.54	1.3	9	17	1	204	C10H20O4	11.28	1.38	10	20	0
203	C9H19N2O3	10.91	1.14	9	19	2	204	C10H22NO3	11.66	1.22	10	22	1
203	C9H3N2O4	10.69	1.32	9	3	2	204	C10H6NO4	11.44	1.4	10	6	1
203	C9H21N3O2	11.28	0.98	9	21	3	204	C10H24N2O2	12.03	1.06	10	24	2
203	C9H5N3O3	11.07	1.16	9	5	3	204	C10H8N2O3	11.81	1.24	10	8	2
203	C9H23N4O	11.66	0.82	9	23	4	204	C10H10N3O2	12.19	1.08	10	10	3
203	C9H7N4O2	11.44	1	9	7	4	204	C10H12N4O	12.56	0.93	10	12	4
203	C10H19O4	11.27	1.38	10	19	0	204	C11H24O3	12.39	1.3	11	24	0
203	C10H21NO3	11.64	1.22	10	21	1	204	C11H8O4	12.17	1.48	11	8	0
203	C10H5NO4	11.42	1.4	10	5	1	204	C11H10NO3	12.55	1.32	11	10	1
203	C10H23N2O2	12.02	1.06	10	23	2	204	C11H12N2O2	12.92	1.17	11	12	2
203	C10H7N2O3	11.8	1.24	10	7	2	204	C11H14N3O	13.29	1.02	11	14	3
203	C10H25N3O	12.39	0.91	10	25	3	204	C11H16N4	13.67	0.87	11	16	4
203	C10H9N3O2	12.17	1.08	10	9	3	204	C11N4O	13.45	1.04	11	0	4
203	C10H11N4O	12.55	0.83	10	11	4	204	C12H12O3	13.28	1.41	12	12	0
203	C11H23O3	12.37	1.3	11	23	0	204	C12H14NO2	13.65	1.26	12	14	1
203	C11H7O4	12.15	1.48	11	7	0	204	C12H16N2O	14.03	1.11	12	16	2

204	C12N2O2	13.81	1.28	12	0	2	205	C13H21N2	15.15	1.07	13	21	2
204	C12H18N3	14.4	0.96	12	18	3	205	C13H5N2O	14.93	1.24	13	5	2
204	C12H2N3O	14.18	1.13	12	2	3	205	C13H7N3	15.3	1.09	13	7	3
204	C12H4N4	14.56	0.99	12	4	4	205	C14H21O	15.5	1.32	14	21	0
204	C13H16O2	14.38	1.36	13	16	0	205	C14H5O2	15.29	1.49	14	5	0
204	C13O3	14.17	1.53	13	0	0	205	C14H23N	15.88	1.18	14	23	1
204	C13H16NO	14.76	1.21	13	16	1	205	C14H7NO	15.66	1.34	14	7	1
204	C13H2NO2	14.54	1.38	13	2	1	205	C14H9N2	16.04	1.2	14	9	2
204	C13H20N2	15.13	1.07	13	20	2	205	C15H25	16.61	1.29	15	25	0
204	C13H4N2O	14.91	1.24	13	4	2	205	C15H9O	16.39	1.46	15	9	0
204	C13H6N3	15.29	1.09	13	6	3	205	C15H11N	16.77	1.32	15	11	1
204	C14H20O	15.49	1.32	14	20	0	205	C16H13	17.5	1.44	16	13	0
204	C14H4O2	15.27	1.49	14	4	0	205	C17H	18.39	1.59	17	1	0
204	C14H22N	15.86	1.18	14	22	1							
204	C14H6NO	15.64	1.34	14	6	1	206	C8H18N2O4	9.85	1.24	8	18	2
204	C14H8N2	16.02	1.2	14	8	2	206	C8H20N3O3	10.23	1.08	8	20	3
204	C15H24	16.59	1.29	15	24	0	206	C8H22N4O2	10.6	0.91	8	22	4
204	C15H8O	16.38	1.45	15	8	0	206	C9H20NO4	10.58	1.31	9	20	1
204	C15H10N	16.75	1.31	15	10	1	206	C9H22N2O3	10.96	1.15	9	22	2
204	C16H12	17.48	1.43	16	12	0	206	C9H6N2O4	10.74	1.32	9	6	2
204	C17	18.37	1.59	17	0	0	206	C9H8N3O3	11.12	1.16	9	8	3
							206	C9H10N4O2	11.49	1.01	9	10	4
205	C8H17N2O4	9.84	1.24	8	17	2	206	C10H22O4	11.31	1.38	10	22	0
205	C8H19N3O3	10.21	1.07	8	19	3	206	C10H8NO4	11.47	1.4	10	8	1
205	C8H21N4O2	10.58	0.91	8	21	4	206	C10H10N2O3	11.85	1.24	10	1	2
205	C9H19NO4	10.57	1.31	9	19	1	206	C10H12N3O2	12.22	1.09	10	12	3
205	C9H21N2O3	10.54	1.15	9	21	2	206	C10H14N4O	12.59	0.93	10	14	4
205	C9H5N2O4	10.72	1.32	9	5	2	206	C11H10O4	12.2	1.48	11	10	0
205	C9H23N3O2	11.32	0.99	9	23	3	206	C11H12NO3	12.58	1.33	11	12	1
205	C9H7N3O3	11.1	1.16	9	7	3	206	C11H14N2O2	12.95	1.17	11	14	2
205	C9H9N4O2	11.47	1	9	9	4	206	C11H16N3O	13.33	1.02	11	16	3
205	C10H21O4	11.3	1.38	10	1	0	206	C11N3O2	13.11	1.19	11	0	3
205	C10H23NO3	11.67	1.22	10	23	1	206	C11H18N4	13.7	0.87	11	18	4
205	C10H7NO4	11.46	1.4	10	7	1	206	C11H2N4O	13.48	1.04	11	2	4
205	C10H9N2O3	11.83	1.24	10	9	2	206	C12H14O3	13.31	1.42	12	14	0
205	C10H11N3O2	12.2	1.09	10	11	3	206	C12H16NO2	13.68	1.27	12	16	1
205	C10H13N4O	12.58	0.93	10	13	4	206	C12NO3	13.47	1.44	12	0	1
205	C11H9O4	12.19	1.48	11	9	0	206	C12H18N2O	14.06	1.12	12	18	2
205	C11H11NO3	12.56	1.33	11	11	1	206	C12H2N2O2	13.84	1.29	12	2	2
205	C11H13N2O2	12.94	1.17	11	13	2	206	C12H20N3	14.43	0.97	12	20	3
205	C11H15N3O	13.31	1.02	11	15	3	206	C12H4N3O	14.21	1.14	12	4	3
205	C11H17N4	13.68	0.87	11	17	4	206	C12H6N4	14.59	0.99	12	6	4
205	C11HN4O	13.47	1.04	11	1	4	206	C13H18O2	14.41	1.36	13	18	0
205	C12H13O3	13.29	1.41	12	13	0	206	C13H2O3	14.2	1.53	13	2	0
205	C12H15NO2	13.67	1.26	12	15	1	206	C13H20NO	14.79	1.22	13	20	1
205	C12H17N2O	14.04	1.11	12	17	2	206	C13H4NO2	14.57	1.39	13	4	1
205	C12HN2O2	13.82	1.28	12	1	2	206	C13H22N2	15.16	1.07	13	22	2
205	C12H19N3	14.42	0.97	12	19	3	206	C13H6N2O	14.95	1.24	13	6	2
205	C12H3N3O	14.2	1.14	12	3	3	206	C13H8N3	15.32	1.1	13	8	3
205	C12H5N4	14.57	0.99	12	5	4	206	C14H22O	15.52	1.32	14	22	0
205	C13H17O2	14.4	1.36	13	17	0	206	C14H6O2	15.3	1.49	14	6	0
205	C13HO3	14.18	1.53	13	1	0	206	C14H24N	15.89	1.18	14	24	1
205	C13H19NO	14.77	1.21	13	19	1	206	C14H8NO	15.68	1.35	14	8	1
205	C13H3NO2	14.56	1.38	13	3	1	206	C14H10N2	16.05	1.21	14	10	2



206	C15H26	16.63	1.29	15	26	0	208	C9H12N4O2	11.52	1.01	9	12	4
206	C15H10O	16.41	1.46	15	10	0	208	C10H10NO4	11.5	1.4	10	10	1
206	C15H12N	16.78	1.32	15	12	1	208	C10H12N2O3	11.82	1.25	10	12	2
206	C16H14	17.51	1.44	16	14	0	208	C10H14N3O2	12.25	1.09	10	14	3
206	C16N	17.67	1.47	16	0		208	C10H16N4O	12.63	0.94	10	16	4
206	C17H2	18.4	1.59	17	2	0	208	C10N4O2	12.41	1.11	10	0	4
							208	C11H12O4	12.24	1.49	11	12	0
207	C8H19N2O4	9.87	1.24	8	19	2	208	C11H14NO3	12.61	1.33	11	14	1
207	C8H21N3O3	10.24	1.08	8	21	3	208	C11H16N2O2	12.98	1.18	11	16	2
207	C9H21NO4	10.6	1.31	9	21	1	208	C11N2O3	12.77	1.35	11	0	2
207	C9H7N2O4	10.76	1.33	9	7	2	208	C11H18N3O	13.36	1.03	11	18	3
207	C9H9N3O3	11.13	1.17	9	9	3	208	C11H2N3O2	13.14	1.2	11	2	3
207	C9H11N4O2	11.51	1.01	9	11	4	208	C11H20N4	13.73	0.88	11	20	4
207	C10H9NO4	11.49	1.4	10	9	1	208	C11H4N4O	13.52	1.05	11	4	4
207	C10H11N2O3	11.86	1.25	10	11	2	208	C12H16O3	13.34	1.42	12	16	0
207	C10H13N3O2	12.24	1.09	10	13	3	208	C12O4	13.12	1.59	12	0	0
207	C10H15N4O	12.61	0.93	10	15	4	208	C12H18NO2	13.71	1.27	12	18	1
207	C11H11O4	12.22	1.48	11	11	0	208	C12H2NO3	13.5	1.44	12	2	1
207	C11H13NO3	12.59	1.33	11	13	1	208	C12H20N2O	14.09	1.12	12	20	2
207	C11H15N2O2	12.97	1.18	11	15	2	208	C12H4N2O2	13.87	1.29	12	4	2
207	C11H17N3O	13.34	1.02	11	17	3	208	C12H22N3	14.46	0.97	12	22	3
207	C11HN3O2	13.13	1.2	11	1	3	208	C12H6N3O	14.25	1.14	12	6	3
207	C11H19N4	13.72	0.87	11	19	4	208	C12H8N4	14.62	1	12	8	4
207	C11H3N4O	13.5	1.04	11	3	4	208	C13H20O2	14.45	1.37	13	20	0
207	C12H15O3	13.32	1.42	12	15	0	208	C13H4O3	14.23	1.54	13	4	0
207	C12H17NO2	13.7	1.27	12	17	1	208	C13H22NO	14.82	1.22	13	22	1
207	C12HNO3	13.48	1.44	12	1	1	208	C13H6NO2	14.6	1.39	13	6	1
207	C12H19N2O	14.07	1.12	12	19	2	208	C13H24N2	15.19	1.08	13	24	2
207	C12H3N2O2	13.86	1.29	12	3	2	208	C13H8N2O	14.98	1.24	13	8	2
207	C12H21N3	14.45	0.97	12	23	3	208	C13H10N3	15.35	1.1	13	10	3
207	C12H5N3O	14.23	1.14	12	5	3	208	C14H24O	15.55	1.33	14	24	0
207	C12H7N4	14.61	0.99	12	7	4	208	C14H8O2	15.33	1.49	14	8	0
207	C13H19O2	14.43	1.37	13	19	0	208	C14H26N	15.93	1.19	14	26	1
207	C13H3O3	14.21	1.54	13	3	0	208	C14H10NO	15.71	1.35	14	10	1
207	C13H21NO	14.8	1.22	13	21	1	208	C14H12N2	16.08	1.21	14	12	2
207	C13H5NO2	14.59	1.39	13	5	1	208	C15H28	16.66	1.3	15	28	0
207	C13H23N2	15.18	1.07	13	23	2	208	C15H12O	16.44	1.46	15	12	0
207	C13H7N2O	14.96	1.24	13	7	2	208	C15H14N	16.81	1.33	15	14	1
207	C13H9N3	15.34	1.1	13	9	3	208	C15N2	16.97	1.35	15	0	2
207	C14H23O	15.54	1.33	14	23	0	208	C16H16	17.55	1.45	16	16	0
207	C14H7O2	15.32	1.49	14	7	0	208	C16O	17.33	1.61	16	0	0
207	C14H25N	15.91	1.18	14	25	1	208	C16H2N	17.7	1.47	16	2	1
207	C14H9NO	15.69	1.35	14	9	1	208	C17H4	18.43	1.6	17	4	0
207	C14H11N2	16.07	1.21	14	11	2							
207	C15H27	16.64	1.3	15	27	0	209	C9H9N2O4	10.79	1.33	9	9	2
207	C15H11O	16.42	1.46	15	11	0	209	C9H11N3O3	11.16	1.17	9	11	3
207	C15H13N	16.8	1.32	15	31	1	209	C9H13N4O2	11.54	1.01	9	13	4
207	C16H15	17.53	1.44	16	15	0	209	C10H11NO4	11.52	1.41	10	11	1
207	C16HN	17.69	1.47	16	1	1	209	C10H13N2O3	11.89	1.25	10	13	2
207	C16H3	18.42	1.6	17	3	0	209	C10H15N3O2	12.27	1.09	10	15	3
							209	C10H17N4O	12.64	0.94	10	17	4
208	C8H20N2O4	9.88	1.24	8	20	2	209	C10HN4O2	12.43	1.11	10	1	4
208	C9H8N2O4	10.77	1.33	9	8	2	209	C11H13O4	12.25	1.49	11	13	0
208	C9H10N3O3	11.15	1.17	9	10	3	209	C11H15NO3	12.63	1.33	11	15	1

209	C11H17N2O2	13	1.18	11	17	2	210	C12H18O3	13.37	1.43	12	18	0
209	C11HN2O3	12.78	1.35	11	1	2	210	C12H2O4	13.16	1.60	12	2	0
209	C11H19N3O	13.37	1.03	11	19	3	210	C12H20NO2	13.75	1.28	12	20	1
209	C11H3N3O2	13.16	1.2	11	3	3	210	C12H4NO3	13.53	1.45	12	4	1
209	C11H21N4	13.75	0.88	11	21	4	210	C12H22N2O	14.12	1.13	12	22	1
209	C11H5N4O	13.53	1.05	11	5	4	210	C12H6N2O2	13.90	1.30	12	6	2
209	C12H17O3	13.36	1.42	12	17	0	210	C12H24N3	14.50	0.98	12	24	3
209	C12HO4	13.14	1.6	12	1	0	210	C12H8N3O	14.28	1.15	12	8	3
209	C12H19NO2	13.73	1.27	12	19	1	210	C12H10N4	14.65	1.00	12	10	4
209	C12H3NO3	13.51	1.44	12	3	1	210	C13H22O2	14.48	1.37	13	22	0
209	C12H21N2O	14.11	1.12	12	21	2	210	C13H6O3	14.26	1.54	13	6	0
209	C12H5N2O2	13.89	1.29	12	5	2	210	C13H24NO	14.85	1.23	13	24	1
209	C12H23N3	14.48	0.98	12	23	3	210	C13H8NO2	14.64	1.40	13	8	1
209	C12H7N3O	14.26	1.15	12	7	3	210	C13H26N2	15.23	1.08	13	26	2
209	C12H9N4	14.64	1.00	12	9	4	210	C13H10N2O	15.01	1.25	13	10	2
209	C13H21O2	14.46	1.37	13	21	0	210	C13H12N3	15.38	1.11	13	12	3
209	C13H5O3	14.25	1.54	13	5	0	210	C14H26O	15.58	1.33	14	26	0
209	C13H23NO	14.84	1.22	13	23	1	210	C14H10O2	15.37	1.50	14	10	0
209	C13H7NO2	14.62	1.39	13	7	1	210	C14H28N	15.96	1.19	14	28	1
209	C13H25N2	15.21	1.09	13	25	2	210	C14H12NO	15.74	1.36	14	12	1
209	C13H9N2O	14.99	1.25	13	9	2	210	C14H14N2	16.12	1.22	14	14	2
209	C13H11N3	15.37	1.10	13	11	3	210	C14N3	16.27	1.24	14	0	3
209	C14H25O	15.57	1.33	14	25	0	210	C15H30	16.69	1.31	15	30	0
209	C14H9O2	15.35	1.50	14	9	0	210	C15H14O	16.47	1.47	15	14	0
209	C14H27N	15.94	1.19	14	27	1	210	C15H16N	16.85	1.33	15	16	1
209	C14H11NO	15.72	1.35	14	11	1	210	C15NO	16.63	1.49	15	0	1
209	C14H13N2	16.10	1.21	14	13	2	210	C15H2N2	17.00	1.36	15	2	2
209	C15H29	16.67	1.30	15	29	0	210	C16H18	17.58	1.45	16	18	0
209	C15H13O	16.46	1.47	15	13	0	210	C16H2O	17.36	1.61	16	2	0
209	C15H15N	16.83	1.33	15	15	1	210	C16H4N	17.74	1.48	16	4	1
209	C15HN2	16.99	1.35	15	1	2	210	C17H6	18.47	1.61	17	6	0
209	C16H17	17.56	1.45	16	17	0							
209	C16HO	17.37	1.61	16	1	0	211	C9H11N2O4	10.82	1.33	9	11	2
209	C16H3N	17.72	1.48	16	3	1	211	C9H13N3O3	11.20	1.17	9	13	3
209	C17H5	18.45	1.60	17	5	0	211	C9H15N4O2	11.57	1.01	9	15	4
							211	C10H13NO4	11.55	1.41	10	13	1
210	C9H10N2O4	10.80	1.33	9	10	2	211	C10H15N2O3	11.93	1.25	10	15	2
210	C9H12N3O3	11.18	1.17	9	12	3	211	C10H17N3O2	12.30	1.10	10	17	3
210	C9H14N4O2	11.55	1.01	9	14	4	211	C10HN3O3	12.08	1.27	10	1	3
210	C10H12NO4	11.54	1.41	10	12	1	211	C10H19N4O	12.67	0.94	10	19	4
210	C10H14N2O3	11.91	1.25	10	14	2	211	C10H3N4O2	12.46	1.12	10	3	4
210	C10H16N3O2	12.28	1.09	10	16	3	211	C11H15O4	12.28	1.49	11	15	0
210	C10N3O3	12.07	1.27	10	0	3	211	C11H17NO3	12.66	1.34	11	17	1
210	C10H18N4O	12.66	0.94	10	18	4	211	C11HNO4	12.44	1.51	11	1	1
210	C10H2N4O2	12.44	1.11	10	2	4	211	C11H19N2O2	13.03	1.18	11	19	2
210	C11H14O4	12.27	1.49	11	14	0	211	C11H3N2O3	12.81	1.36	11	3	2
210	C11H16NO3	12.64	1.34	11	16	1	211	C11H21N3O	13.41	1.03	11	21	3
210	C11NO4	12.42	1.51	11	0	1	211	C11H5N3O2	13.19	1.20	11	5	3
210	C11H18N2O2	13.02	1.18	11	18	2	211	C11H23N4	13.78	0.88	11	23	4
210	C11H2N2O3	12.80	1.35	11	2	2	211	C11H7N4O	13.56	1.05	11	7	4
210	C11H20N3O	13.39	1.03	11	20	3	211	C12H19O3	13.39	1.43	12	19	0
210	C11H4N3O2	13.17	1.20	11	4	3	211	C12H3O4	13.17	1.60	12	3	0
210	C11H22N4	13.76	0.88	11	22	4	211	C12H21NO2	13.76	1.28	12	21	1
210	C11H6N4O	13.55	1.05	11	6	4	211	C12H5NO3	13.55	1.45	12	5	1

211	C12H23N2O	14.14	1.13	12	23	2	212	C12H12N4	14.69	1.01	12	12	4
211	C12H7N2O2	13.90	1.30	12	7	2	212	C13H24O2	14.51	1.38	13	24	0
211	C12H25N3	14.51	0.98	12	25	3	212	C13H8O3	14.29	1.55	13	8	0
211	C12H9N3O	14.29	1.15	12	9	3	212	C13H26NO	14.88	1.23	13	26	1
211	C12H11N4	14.67	1.00	12	11	4	212	C13H10NO2	14.67	1.40	13	10	1
211	C13H23O2	14.49	1.38	13	23	0	212	C13H28N2	15.26	1.09	13	28	2
211	C13H7O3	14.28	1.54	13	7	0	212	C13H12N2O	15.04	1.25	13	12	2
211	C13H25NO	14.87	1.23	13	25	1	212	C13H14N3	15.42	1.11	13	14	3
211	C13H9NO2	14.65	1.40	13	9	1	212	C13N4	15.57	1.13	13	0	4
211	C13H27N2	15.24	1.08	13	27	2	212	C14H28O	15.62	1.34	14	28	0
211	C13H11N2O	15.03	1.25	13	11	2	212	C14H12O2	15.40	1.50	14	12	0
211	C13H13N3	15.40	1.11	13	13	3	212	C14H30N	15.99	1.20	14	30	1
211	C14H27O	15.60	1.34	14	27	0	212	C14H14NO	15.77	1.36	14	14	1
211	C14H11O2	15.38	1.50	14	11	0	212	C14H16N2	16.15	1.22	14	16	2
211	C14H29N	15.97	1.19	14	29	1	212	C14N2O	15.93	1.39	14	0	2
211	C14H13NO	15.76	1.36	14	13	1	212	C14H2N3	16.30	1.25	14	2	3
211	C14H15N2	16.13	1.22	14	15	2	212	C15H23	16.72	1.31	15	23	0
211	C14HN3	16.29	1.24	14	1	3	212	C15H16O	16.50	1.47	15	16	0
211	C15H31	16.71	1.31	15	31	0	212	C15O2	16.29	1.64	15	0	0
211	C15H15O	16.49	1.47	15	15	0	212	C15H18N	16.88	1.34	15	18	1
211	C15H17N	16.86	1.33	15	17	1	212	C15H2NO	16.66	1.50	15	2	1
211	C15HNO	16.65	1.50	15	1	1	212	C15H4N2	17.04	1.36	15	4	2
211	C15H3N2	17.02	1.36	15	3	2	212	C16H20	17.61	1.46	16	20	0
211	C16H19	17.59	1.45	16	19	0	212	C16H4O	17.39	1.62	16	4	0
211	C16H3O	17.38	1.62	16	3	0	212	C16H6N	17.77	1.48	16	6	1
211	C16H5N	17.75	1.48	16	5	1	212	C17H8	18.50	1.61	17	8	0
211	C17H17	18.48	1.61	17	17	0							
							213	C9H13N2O4	10.85	1.34	9	13	2
212	C9H12N2O4	10.84	1.34	9	12	2	213	C9H15N3O3	11.23	1.18	9	15	3
212	C9H14N3O3	11.21	1.18	9	14	3	213	C9H17N4O2	11.60	1.02	9	17	4
212	C9H16N4O2	11.59	1.02	9	16	4	213	C10HN2O4	11.74	1.43	10	1	2
212	C10H14NO4	11.57	1.41	10	14	1	213	C10H19N3O2	12.33	1.10	10	19	3
212	C10H16N2O3	11.94	1.25	10	16	2	213	C10H3N3O3	12.12	1.27	10	3	3
212	C10N2O4	11.73	1.43	10	0	2	213	C10H21N4O	12.71	0.95	10	21	4
212	C10H18N3O2	12.32	1.10	10	18	3	213	C10H5N4O2	12.49	1.12	10	5	4
212	C10H20N4O	12.10	1.27	10	20	4	213	C11H17O4	12.32	1.50	11	17	0
212	C10H4N4O	12.69	0.94	10	4	4	213	C11H19NO3	12.69	1.34	11	19	1
212	C11H16O4	12.30	1.49	11	16	0	213	C11H3NO4	12.47	1.51	11	3	1
212	C11H18NO3	12.67	1.34	11	18	1	213	C11H21N2O2	13.06	1.19	11	21	2
212	C11H2NO4	12.46	1.51	11	2	1	213	C11H5N2O3	12.85	1.36	11	5	2
212	C11H20N2O2	13.05	1.19	11	20	2	213	C11H23N3O	13.44	1.04	11	23	3
212	C11H4N2O3	12.83	1.36	11	4	2	213	C11H7N3O2	13.22	1.21	11	7	3
212	C11H22N3O	13.42	1.03	11	22	3	213	C11H25N4	13.81	0.89	11	25	4
212	C11H6N3O2	13.21	1.21	11	6	3	213	C11H9N4O	13.60	1.06	11	9	4
212	C11H24N4	13.80	0.88	11	24	4	213	C12H21O3	13.42	1.43	12	21	0
212	C11H8N4O	13.58	1.06	11	8	4	213	C12H5O4	13.20	1.60	12	5	0
212	C12H20O3	13.40	1.43	12	20	0	213	C12H23NO2	13.79	1.28	12	23	1
212	C12H4O4	13.19	1.60	12	4	0	213	C12H7NO3	13.58	1.45	12	7	1
212	C12H22NO2	13.78	1.28	12	22	1	213	C12H25N2O	14.17	1.13	12	25	2
212	C12H6NO3	13.56	1.45	12	6	1	213	C12H9N2O2	13.95	1.30	12	9	2
212	C12H24N2O	14.15	1.13	12	24	2	213	C12H27N3	14.54	0.99	12	27	3
212	C12H8N2O2	13.94	1.30	12	8	2	213	C12H11N3O	14.33	1.15	12	11	3
212	C12H26N3	14.53	1.98	12	26	3	213	C12H13N4	14.70	1.01	12	13	4
212	C12H10N3O	14.31	1.15	12	10	3	213	C13H25O2	14.53	1.38	13	25	0

213	C13H9O3	14.31	1.55	13	9	0	214	C13H28NO	14.92	1.24	13	28	1
213	C13H27NO	14.90	1.23	13	27	1	214	C13H12NO2	14.70	1.40	13	12	1
213	C13H11NO2	14.68	1.40	13	11	1	214	C13H30N2	15.29	1.09	13	30	2
213	C13H29N2	15.27	1.09	13	29	2	214	C13H14N2O	15.07	1.26	13	14	2
213	C13H13N2O	15.06	1.26	13	13	2	214	C13N3O	15.23	1.28	13	0	3
213	C13H15N3	15.43	1.11	13	15	3	214	C13H2N4	15.61	1.14	13	2	4
213	C13HN4	15.59	1.14	13	1	4	214	C14H30O	15.65	1.34	14	30	0
213	C14H29O	15.63	1.34	14	29	0	214	C14H14O2	15.43	1.51	14	14	0
213	C14H13O2	15.41	1.51	14	13	0	214	C14H16NO	15.80	1.37	14	16	1
213	C14H31N	16.01	1.20	14	31	1	214	C14NO2	15.59	1.53	14	0	1
213	C14H15NO	15.79	1.36	14	15	1	214	C14H18N2	16.18	1.23	14	18	2
213	C14H17N2	16.16	1.22	14	17	2	214	C14H2N2O	15.96	1.39	14	2	2
213	C14HN2O	15.95	1.39	14	1	2	214	C14H4N3	16.34	1.25	14	4	3
213	C14H3N3	16.32	1.25	14	3	3	214	C15H18O	16.54	1.48	15	18	0
213	C15H17O	16.52	1.48	15	17	0	214	C15H2O2	16.32	1.64	15	2	0
213	C15HO2	16.30	1.64	15	1	0	214	C15H20N	16.91	1.34	15	20	1
213	C15H19N	16.89	1.34	15	19	1	214	C15H4NO	16.69	1.51	15	4	1
213	C15H3NO	16.68	1.60	15	3	1	214	C15H6N2	17.07	1.37	15	6	2
213	C15H5N2	17.05	1.36	15	5	2	214	C16H22	17.64	1.46	18	22	0
213	C16H21	17.63	1.46	16	21	0	214	C16H6O	17.42	1.63	16	6	0
213	C16H5O	17.41	1.62	16	5	0	214	C16H8N	17.80	1.49	16	8	1
213	C16H7N	17.78	1.49	16	7	1	214	C17H10	18.53	1.62	17	10	0
213	C17H9	18.51	1.61	17	9	0							
							215	C9H15N2O4	10.88	1.34	9	15	2
214	C9H14N2O4	10.87	1.34	9	14	2	215	C9H17N3O3	11.26	1.18	9	17	3
214	C9H16N3O3	11.24	1.18	9	16	3	215	C9H19N4O2	11.63	1.02	9	19	4
214	C9H18N4O2	11.62	1.02	9	18	4	215	C10H17NO4	11.62	1.42	9	17	1
214	C10H16NO4	11.60	1.42	10	16	1	215	C10H19N2O3	11.99	1.26	9	19	2
214	C10H18N2O3	11.97	1.26	10	18	2	215	C10H3N2O4	11.77	1.44	10	3	2
214	C10H2N2O4	11.76	1.43	10	2	2	215	C10H21N3O2	12.36	1.10	10	21	3
214	C10H20N3O2	12.35	1.10	10	20	3	215	C10H5N3O3	12.15	1.28	10	5	3
214	C10H4N3O3	12.13	1.18	10	4	3	215	C10H23N4O	12.74	0.95	10	23	4
214	C10H22N4O	12.72	0.95	10	22	4	215	C10H7N4O2	12.52	1.12	10	7	4
214	C10H6N4O2	12.51	1.12	10	6	4	215	C11H19O4	12.35	1.50	10	19	0
214	C11H18O4	12.33	1.50	11	18	0	215	C11H21NO3	12.72	1.35	11	21	1
214	C11H20NO3	12.71	1.34	11	20	1	215	C11H5NO4	12.50	1.52	11	5	1
214	C11H4NO4	12.49	1.52	11	4	1	215	C11H23N2O2	13.10	1.19	11	23	2
214	C11H22N2O2	13.08	1.19	11	22	2	215	C11H7N2O3	12.88	1.37	11	7	2
214	C11H6N2O3	12.86	1.36	11	6	2	215	C11H25N3O	13.47	1.04	11	25	3
214	C11H24N3O	13.45	1.04	11	24	3	215	C11H9N3O2	13.25	1.21	11	9	3
214	C11H8N3O2	13.24	1.21	11	8	3	215	C11H27N4	13.84	0.89	11	27	4
214	C11H26N4	13.83	0.89	11	26	4	215	C11H11N4O	13.63	1.06	11	11	4
214	C11H10N4O	13.61	1.06	11	10	4	215	C12H23O3	13.45	1.44	12	23	0
214	C12H22O3	13.44	1.43	12	22	0	215	C12H7O4	13.24	1.61	12	7	0
214	C12H6O4	13.22	1.61	12	6	0	215	C12H25NO2	13.83	1.29	12	25	1
214	C12H24NO2	13.81	1.28	12	24	1	215	C12H9NO3	13.61	1.46	12	9	1
214	C12H8NO3	13.59	1.45	12	8	1	215	C12H27N2O	14.20	1.14	12	27	2
214	C12H26N2O	14.19	1.14	12	26	2	215	C12H11N2O2	13.98	1.31	12	11	2
214	C12H10N2O2	13.97	1.30	12	10	2	215	C12H29N3	14.58	0.99	12	29	3
214	C12H28N3	14.56	0.99	12	28	3	215	C12H13N3O	14.36	1.16	12	13	3
214	C12H12N3O	14.34	1.16	12	12	3	215	C12H15N4	14.73	1.01	12	15	4
214	C12H14N4	14.72	1.01	12	14	4	215	C13H27O2	14.56	1.38	13	27	0
214	C13H26O2	14.54	1.38	13	26	0	215	C13H11O3	14.34	1.55	13	11	0
214	C13H10O3	14.33	1.55	13	10	0	215	C13H29NO	14.93	1.24	13	29	1

215	C13H13NO2	14.72	1.41	13	13	1	216	C13H18N3	15.48	1.12	13	18	3
215	C13H15N2O	15.09	1.26	13	15	2	216	C13H2N3O	15.26	1.29	13	2	3
215	C13H17N3	15.46	1.12	13	17	3	216	C13H4N4	15.64	1.14	13	4	4
215	C13HN3O	15.25	1.28	13	1	3	216	C14H16O2	15.46	1.51	14	16	0
215	C13H3N4	15.62	1.14	13	3	4	216	C14O3	15.25	1.68	14	0	0
215	C14H15O2	15.45	1.51	14	15	0	216	C14H18NO	15.84	1.37	14	18	1
215	C14H17NO	15.82	1.37	14	17	1	216	C14H2NO2	15.62	1.54	14	2	1
215	C14HNO2	15.60	1.54	14	1	1	216	C14H20N2	16.21	1.23	14	20	2
215	C14H19N2	16.20	1.54	4	19	2	216	C14H4N2O	15.99	1.40	14	4	2
215	C14H3N2O	15.98	1.39	14	3	2	216	C14H6N3	16.37	1.26	14	6	3
215	C14H5N3	16.35	1.25	14	5	3	216	C15H20O	16.57	1.49	15	20	0
215	C15H19O	16.55	1.48	15	19	0	216	C15H4O2	16.35	1.65	15	4	0
215	C15H3O2	16.34	1.65	15	3	0	216	C15H22N	16.94	1.35	15	22	1
215	C15H21N	16.93	1.34	15	21	1	216	C15H6NO	16.73	1.51	15	6	1
215	C15H5NO	16.71	1.51	15	5	1	216	C15H8N2	17.10	1.37	15	8	2
215	C15H7N2	17.08	1.37	15	7	2	216	C16H24	17.67	1.47	16	24	0
215	C16H23	17.66	1.47	16	23	0	216	C16H8O	17.46	1.63	16	8	0
215	C16H7O	17.44	1.63	16	7	0	216	C16H10N	17.83	1.50	16	10	1
215	C16H9N	17.82	1.49	16	9	1	216	C17H12	18.56	1.62	17	12	0
215	C17H11	18.55	1.62	17	11	0	216	C18	19.45	1.79	18	0	0
216	C9H16N2O4	10.80	1.34	9	16	2	217	C9H17N2O4	10.92	1.34	9	17	2
216	C9H18N3O3	11.28	1.18	9	18	3	217	C9H19N3O3	11.29	1.18	9	19	3
216	C9H20N4O2	11.65	1.02	9	20	4	217	C9H21N4O2	11.67	1.03	9	21	4
216	C10H18NO4	11.63	1.42	10	18	1	217	C10H19NO4	11.65	1.42	10	19	1
216	C10H20N2O3	12.01	1.26	10	20	2	217	C10H21N2O3	12.02	1.26	10	21	2
216	C10H4N2O4	11.79	1.44	10	4	2	217	C10H5N2O4	11.81	1.44	10	5	2
216	C10H22N3O2	12.38	1.11	10	22	3	217	C10H23N3O2	12.40	1.11	10	23	3
216	C10H6N3O3	12.16	1.28	10	6	3	217	C10H7N3O3	12.18	1.28	10	7	3
216	C10H24N4O	12.75	0.95	10	24	4	217	C10H25N4O	12.77	0.95	10	25	4
216	C10H8N4O2	12.54	1.13	12	8	4	217	C10H9N4O2	12.55	1.13	10	9	4
216	C10H20O4	12.36	1.50	10	20	0	217	C11H21O4	12.38	1.50	10	21	0
216	C10H22NO3	12.74	1.35	10	22	1	217	C11H23NO3	12.75	1.35	11	23	1
216	C11HNO4	12.52	1.52	11	1	1	217	C11H7NO4	12.54	1.52	11	7	1
216	C11H24N2O2	13.11	1.19	11	24	2	217	C11H25N2O2	13.13	1.20	11	25	2
216	C11H8N2O3	12.89	1.37	11	8	2	217	C11H9N2O3	12.91	1.37	11	9	2
216	C11H26N3O	13.49	1.04	11	26	3	217	C11H27N3O	13.50	1.05	11	27	3
216	C11H10N3O2	13.27	1.21	11	10	3	217	C11H11N3O2	13.29	1.22	11	11	3
216	C11H28N4	13.86	0.89	11	28	4	217	C11H13N4O	13.66	1.07	11	13	4
216	C11H12N4O	13.64	1.06	11	12	4	217	C12H25O3	13.48	1.44	12	25	0
216	C12H24O3	13.47	1.44	12	24	0	217	C12H9O4	13.27	1.61	12	9	0
216	C12H8O4	13.25	1.61	12	8	0	217	C12H27NO2	13.86	1.29	12	27	1
216	C12H26NO2	13.84	1.29	12	26	1	217	C12H11NO3	13.64	1.46	12	11	1
216	C12H10NO3	13.68	1.46	12	10	1	217	C12H13N2O2	14.02	1.31	12	13	2
216	C12H28N2O	14.22	1.14	12	28	2	217	C12H15N3O	14.39	1.16	12	15	3
216	C12H12N2O2	14.00	1.31	12	12	2	217	C12H17N4	14.77	1.02	12	17	4
216	C12H14N3O	14.37	1.16	12	14	3	217	C12HN4O	14.55	1.19	12	1	4
216	C12H16N4	14.75	1.01	12	16	4	217	C13H13O3	14.37	1.56	13	13	0
216	C12N4O	14.53	1.18	12	0	4	217	C13H15NO2	14.75	1.41	13	15	1
216	C13H28O2	14.57	1.39	13	28	0	217	C13H17N2O	15.12	1.27	13	17	2
216	C13H12O3	14.36	1.56	13	12	0	217	C13HN2O2	14.90	1.43	13	1	2
216	C13H14NO2	14.73	1.41	13	14	1	217	C13H19N3	15.50	1.12	13	19	3
216	C13H16N2O	15.11	1.26	13	16	2	217	C13H3N3O	15.28	1.29	13	3	3
216	C13N2O2	14.89	1.43	13	0	2	217	C13H5N4	15.65	1.15	13	5	4

217	C14H17O2	15.48	1.52	14	17	0	218	C14H4NO2	15.65	1.54	14	4	1
217	C14HO3	15.26	1.68	14	1	0	218	C14H22N2	16.24	1.24	14	22	2
217	C14H19NO	15.85	1.37	14	19	1	218	C14H6N2O	16.03	1.40	16	6	2
217	C14H3NO2	15.64	1.54	14	3	1	218	C14H8N3	16.40	1.26	14	8	3
217	C14H21N2	16.23	1.23	14	21	2	218	C15H22O	16.60	1.49	15	22	0
217	C14H5N2O	16.01	1.40	14	5	2	218	C15H6O2	16.38	1.66	15	6	0
217	C14H7N3	16.38	1.26	14	7	3	218	C15H24N	16.97	1.35	15	24	1
217	C15H21O	16.58	1.49	15	21	0	218	C15H8NO	16.76	1.52	15	8	1
217	C15H5O2	16.37	1.65	15	5	0	218	C15H10N2	17.13	1.38	15	10	2
217	C15H23N	16.96	1.35	15	23	1	218	C16H26	17.71	1.47	16	26	0
217	C15H7NO	16.74	1.51	15	7	1	218	C16H10O	17.49	1.64	16	10	0
217	C15H9N2	17.12	1.38	15	9	2	218	C16H12N	17.86	1.50	16	12	1
217	C16H25	17.69	1.47	16	25	0	218	C17H14	18.59	1.63	17	14	0
217	C16H9O	17.47	1.63	16	9	0	218	C17N	18.75	1.66	17	0	1
217	C16H11N	17.85	1.50	16	11	1	218	C18H2	19.48	1.79	18	2	0
217	C17H13	18.58	1.63	17	13	0	219	C9H19N2O4	10.95	1.35	9	19	2
217	C18H	19.47	1.79	18	1	0	219	C9H21N3O3	11.32	1.19	9	21	3
218	C9H18N2O4	10.90	1.35	9	18	2	219	C9H23N4O2	11.70	1.03	9	23	4
218	C9H20N3O3	11.31	1.19	9	20	3	219	C10H21NO4	11.68	1.42	10	21	1
218	C9H22N4O2	11.68	1.03	9	22	4	219	C10H23N2O3	12.05	1.27	10	23	2
218	C10H20NO4	11.66	1.42	10	20	1	219	C10H7N2O4	11.84	1.44	10	7	2
218	C10H22N2O3	12.04	1.27	10	22	2	219	C10H25N3O2	12.43	1.11	10	25	3
218	C10H6N2O4	11.82	1.44	10	6	2	219	C10H9N3O3	12.21	1.29	10	9	3
218	C10H24N3O2	12.41	1.11	10	24	3	219	C10H11N4O2	12.59	1.13	10	11	4
218	C10H8N3O3	12.20	1.28	10	8	3	219	C11H23O4	12.41	1.51	11	23	0
218	C10H26N4O	12.79	0.96	10	26	4	219	C11H25NO3	12.79	1.35	11	25	1
218	C10H10N4O2	12.57	1.13	10	10	4	219	C11H9NO4	12.57	1.53	11	9	1
218	C11H22O4	12.40	1.51	10	22	0	219	C11H11N2O3	12.94	1.37	11	11	2
218	C11H24NO3	12.77	1.35	11	24	1	219	C11H13N3O2	13.32	1.22	11	13	3
218	C11H8NO4	12.55	1.52	11	8	1	219	C11H15N4O	13.69	1.07	11	15	4
218	C11H26N2O2	13.14	1.20	11	26	2	219	C12H11O4	13.30	1.62	12	11	0
218	C11H10N2O3	12.93	1.27	11	10	2	219	C12H13NO3	13.67	1.47	12	13	1
218	C11H12N3O2	13.30	1.22	11	12	3	219	C12H15N2O2	14.05	1.32	12	15	2
218	C11H14N4O	13.68	1.07	11	14	4	219	C12H17N3O	14.42	1.17	12	17	3
218	C11H26O3	13.50	1.44	11	26	0	219	C12HN3O2	14.21	1.34	12	1	3
218	C12H10O4	13.28	1.61	12	10	0	219	C12H19N4	14.80	1.02	12	19	4
218	C12H12NO3	13.66	1.46	12	12	3	219	C12H3N4O	14.58	1.19	12	3	4
218	C12H14N2O2	14.03	1.31	12	14	2	219	C13H15O3	14.41	1.56	13	15	0
218	C12H16N3O	14.41	1.17	12	16	3	219	C13H17NO2	14.78	1.42	13	17	1
218	C12N3O2	14.19	1.34	12	0	3	219	C13HNO3	14.56	1.59	13	1	1
218	C12H18N4	14.78	1.02	12	18	4	219	C13H19N2O	15.15	1.29	13	19	2
218	C12H2N4O	14.56	1.19	12	2	4	219	C13H3N2O2	14.94	1.44	13	3	2
218	C13H14O3	14.39	1.56	13	14	0	219	C13H21N3	15.53	1.13	13	21	3
218	C13H16NO2	14.76	1.41	13	16	1	219	C13H5N3O	15.31	1.29	13	5	3
218	C13NO3	14.55	1.58	13	0	1	219	C13H7N4	15.69	1.15	13	7	4
218	C13H18N2O	15.14	1.27	13	18	2	219	C14H19O2	15.51	1.52	14	19	0
218	C13H2N2O2	14.92	1.44	13	2	2	219	C14H3O3	15.29	1.69	14	3	0
218	C13H20N3	15.51	1.13	13	20	3	219	C14H21NO	15.89	1.39	14	21	1
218	C13H4N3O	15.30	1.29	13	4	3	219	C14H5NO2	15.67	1.55	14	5	1
218	C13H6N4	15.67	1.15	13	6	4	219	C14H23N2	16.26	1.24	14	23	2
218	C13H18O2	15.49	1.52	13	18	0	219	C14H7N2O	16.04	1.40	14	7	2
218	C14H2O3	15.28	1.69	14	2	0	219	C14H9N3	16.42	1.26	14	9	3
218	C14H20NO	15.87	1.38	14	20	1	219	C15H23O	16.62	1.49	15	23	0

219	C15H7O2	16.40	1.66	15	7	0	220	C16H12O	17.52	1.64	16	12	0
219	C15H25N	16.99	1.36	15	25	1	220	C16H14N	17.90	1.51	16	14	1
219	C15H9NO	16.77	1.52	15	9	1	220	C16N2	18.05	1.53	16	0	2
219	C15HH11N2	17.15	1.38	15	11	2	220	C17H16	18.63	1.64	17	16	0
219	C16H27	17.72	1.48	16	27	0	220	C17O	18.41	1.80	17	0	0
219	C16H13N	17.88	1.50	16	13	1	220	C17H2N	18.78	1.66	17	2	1
219	C17H15	18.61	1.63	17	15	0	220	C18H4	19.51	1.80	18	4	0
219	C17HN	18.77	1.66	17	1	1							
219	C18H3	19.50	1.80	18	3	0	221	C9H21N2O4	10.98	1.35	9	21	2
							221	C9H23N3O3	11.36	1.19	9	23	3
220	C9H20N2O4	10.96	1.35	9	20	2	221	C10H23NO4	11.71	1.43	10	23	1
220	C9H22N3O3	11.34	1.19	9	22	3	221	C10H9N2O4	11.87	1.45	10	9	2
220	C9H24N4O2	11.71	1.03	9	2	4	221	C10H11N3O3	12.24	1.29	10	11	3
220	C10H22NO4	11.70	1.43	9	22	1	221	C10H13N4O2	12.62	1.14	10	13	4
220	C10H24N2O3	12.07	1.27	10	24	2	221	C11H11NO4	12.60	1.53	11	11	1
220	C10H8N2O4	11.85	1.44	10	8	2	221	C11H13N2O3	12.97	1.38	11	13	2
220	C10H10N3O3	12.23	1.29	10	10	3	221	C11H15N3O2	13.35	1.23	11	15	3
220	C10H12N4O2	12.60	1.13	10	12	4	221	C11H17N4O	13.72	1.07	11	17	4
220	C11H24O4	12.43	1.51	11	24	0	221	C11HN4O2	13.51	1.25	11	1	4
220	C11H10NO4	12.58	1.53	11	10	1	221	C12H13O4	13.33	1.62	12	13	0
220	C11H12N2O3	12.96	1.38	11	12	2	221	C12H15NO3	13.71	1.47	12	15	1
220	C11H14N3O2	13.33	1.22	11	14	3	221	C12H17N2O2	14.08	1.32	12	17	2
220	C11H16N4O	13.71	1.07	11	16	4	221	C12HN2O3	13.86	1.49	12	1	2
220	C11N4O2	13.49	1.24	11	0	4	221	C12H19N3O	14.45	1.17	12	19	3
220	C12H12O4	13.32	1.62	12	12	0	221	C12H3N3O2	14.24	1.34	12	3	3
220	C12H14NO3	13.69	1.47	12	14	1	221	C12H21N4	14.83	1.03	12	21	4
220	C12H16N2O2	14.06	1.32	12	16	2	221	C12H5N4O	14.61	1.20	12	5	4
220	C12N2O3	13.85	1.49	12	0	2	221	C13H17O3	14.44	1.57	13	17	0
220	C12H18N3O	14.44	1.17	12	18	3	221	C13HO4	14.22	1.74	13	1	0
220	C12H2N3O2	14.22	1.34	12	2	3	221	C13H19NO2	14.81	1.42	13	19	1
220	C12H20N4	14.81	1.02	12	20	4	221	C13H3NO3	14.59	1.59	13	3	1
220	C12H4N4O	14.60	1.19	12	4	4	221	C13H21N2O	15.19	1.28	13	21	2
220	C13H16O3	14.42	1.57	13	16	0	221	C13H5N2O2	14.97	1.44	13	5	2
220	C13O4	14.20	1.73	13	0	0	221	C13H23N3	15.56	1.13	13	23	3
220	C13H18NO2	14.80	1.42	13	18	1	221	C13H7N3O	15.34	1.30	13	7	3
220	C13H2NO3	14.58	1.59	13	2	1	221	C13H9N4	15.72	1.16	13	9	4
220	C13H20N2O	15.17	1.27	13	20	2	221	C14H21O2	15.54	1.53	14	21	0
220	C13H4N2O2	14.95	1.44	13	4	2	221	C14H23NO	15.92	1.58	14	23	1
220	C13H22N3	15.54	1.13	13	22	3	221	C14H7NO2	15.70	1.55	14	7	1
220	C13H6N3O	15.33	1.30	13	6	3	221	C14H25N2	16.29	1.24	14	25	2
220	C13H8N4	15.70	1.15	13	8	4	221	C14H9N2O	16.07	1.41	14	9	2
220	C14H20O2	15.53	1.52	14	20	0	221	C14H11N3	16.45	1.27	14	11	3
220	C14H4O3	15.31	1.69	14	4	0	221	C15H25O	16.65	1.50	15	25	0
220	C14H22NO	15.90	1.38	14	22	1	221	C15H9O2	16.43	1.66	15	9	0
220	C14H6NO2	15.68	1.55	14	6	1	221	C15H27N	17.02	1.36	15	27	1
220	C14H24N2	16.28	1.24	14	24	2	221	C15H11NO	16.81	1.52	15	11	1
220	C14H8N2O	16.06	1.41	14	8	2	221	C15H13N2	17.18	1.39	15	13	2
220	C14H10N3	16.43	1.27	14	10	3	221	C16H26	17.75	1.48	16	26	0
220	C15H24O	16.63	1.50	15	24	0	221	C16H13O	17.53	1.63	16	13	0
220	C15H8O2	16.42	1.66	15	8	0	221	C16H15N	17.91	1.51	16	15	1
220	C15H26N	17.01	1.66	15	26	1	221	C16HN2	18.07	1.54	16	1	2
220	C15H10NO	16.79	1.52	15	10	1	221	C17H17	18.64	1.64	17	17	0
220	C15H12N2	17.16	1.38	15	12	2	221	C17HO	18.43	1.80	17	1	0
220	C16H28	17.74	1.48	16	28	0	221	C17H3N	18.80	1.67	17	3	0

221	C18H5	19.53	1.80	18	5	0	223	C10H13N3O3	12.28	1.29	10	13	3
							223	C10H15N4O2	12.65	1.14	10	15	4
222	C9H22N2O4	11.00	1.35	9	22	2	223	C11H13NO4	12.63	1.53	11	13	1
222	C10H10N2O4	11.89	1.45	10	1	2	223	C11H15N2O3	13.01	1.38	11	15	2
222	C10H12N3O3	12.26	1.29	10	12	3	223	C11H17N3O2	13.38	1.23	11	17	3
222	C10H14N4O2	12.63	1.14	10	14	4	223	C11HN3O3	13.16	1.40	11	1	3
222	C11H12NO4	12.62	1.53	11	12	1	223	C11H19N4O	13.76	1.08	11	19	4
222	C11H14N2O3	12.99	1.38	11	14	2	223	C11H3N4O2	13.54	1.25	11	3	4
222	C11H16N3O2	13.37	1.23	11	16	3	223	C12H15O4	13.36	1.62	12	15	0
222	C11N3O3	13.15	1.40	11	0	3	223	C12H17NO3	13.74	1.47	12	17	1
222	C11H18N4O	13.74	1.08	11	18	4	223	C12HNO4	13.52	1.65	12	1	1
222	C11H2N4O2	13.52	1.25	11	2	4	223	C12H19N2O2	14.11	1.33	12	19	2
222	C12H14O4	13.25	1.62	12	14	0	223	C12H3N2O3	13.90	1.50	12	3	2
222	C12H16NO3	13.72	1.47	12	16	1	223	C12H21N3O	14.49	1.18	12	21	3
222	C12NO4	13.51	1.64	12	0	1	223	C12H5N3O2	14.27	1.35	12	5	3
222	C12H18N2O2	14.10	1.32	12	18	2	223	C12H23N4	14.86	1.03	12	23	4
222	C12H2N2O3	13.88	1.49	12	2	2	223	C12H7N4O	14.64	1.20	12	7	4
222	C12H20N3O	14.47	1.18	12	20	3	223	C13H19O3	14.47	1.57	13	19	0
222	C12H4N3O2	14.25	1.34	13	4	3	223	C13H3O4	14.25	1.64	13	3	0
222	C12H22N4	14.85	1.03	12	22	4	223	C13H21NO2	14.84	1.43	13	21	1
222	C12H6N4O	14.63	1.20	12	6	4	223	C13H5NO3	14.63	1.59	13	5	1
222	C13H18O3	14.45	1.57	13	18	0	223	C13H23N2O	15.22	1.28	13	23	2
222	C13H2O4	14.24	1.74	13	2	0	223	C13H7N2O2	15.00	1.45	13	7	2
222	C13H20NO2	14.83	1.42	13	20	1	223	C13H25N3	15.59	1.14	13	25	3
222	C13H4NO3	14.61	1.59	13	4	1	223	C14H23O2	15.57	1.53	14	23	0
222	C13H22N2O	15.20	1.28	13	22	2	223	C14H7O3	15.36	1.70	14	7	0
222	C13H6N2O2	14.98	1.45	13	6	2	223	C14H25NO	15.95	1.39	14	25	1
222	C13H24N3	15.58	1.13	13	24	3	223	C14H9NO2	15.73	1.56	14	9	1
222	C13H8N3O	15.36	1.30	13	8	3	223	C14H27N2	16.32	1.25	14	27	2
222	C13H10N4	15.73	1.16	13	10	4	223	C14H11N2O	16.11	1.41	14	11	2
222	C14H22O2	15.56	1.53	14	22	0	223	C14H13N3	16.48	1.27	14	13	3
222	C14H6O3	15.34	1.70	14	8	0	223	C15H27O	16.68	1.50	15	27	0
222	C14H24NO	15.93	1.39	14	24	2	223	C15H11O2	16.46	1.67	15	11	0
222	C14H8NO2	15.72	1.55	14	8	1	223	C15H29N	17.05	1.37	15	29	1
222	C14H26N2	16.31	1.25	14	26	2	223	C15H13NO	16.84	1.53	15	13	1
222	C14H10N2O	16.09	1.41	14	10	2	223	C15H15N2	17.21	1.39	15	15	2
222	C14H12N3	16.46	1.27	14	12	3	223	C15HN3	17.37	1.42	15	1	3
222	C15H26O	16.66	1.50	15	26	0	223	C16H31	17.79	1.49	16	31	0
222	C15H10O2	16.45	1.67	15	10	0	223	C16H15O	17.57	1.65	16	15	0
222	C15H28N	17.04	1.36	15	28	1	223	C16H17N	17.94	1.52	16	17	1
222	C15H12NO	16.82	1.53	15	12	1	223	C16HNO	17.73	1.68	16	1	1
222	C15H14N2	17.20	1.39	15	14	2	223	C16H3N2	18.10	1.54	16	3	2
222	C15N3	17.35	1.42	15	0	3	223	C17H19	18.67	1.64	17	19	0
222	C16H30	17.77	1.49	16	30	0	223	C17H3O	18.46	1.80	17	3	0
222	C16H14O	17.55	1.65	16	14	0	223	C17H5N	18.83	1.67	17	5	1
222	C16H16N	17.93	1.51	16	16	1	223	C18H7	19.56	1.81	18	7	0
222	C16NO	17.71	1.67	16	0	1							
222	C16H2N2	18.08	1.54	16	2	2	224	C10H12N2O4	11.92	1.45	10	12	2
222	C17H18	18.66	1.64	17	18	0	224	C10H14N3O3	12.29	1.30	10	14	3
222	C17H2O	18.44	1.80	17	2	0	224	C10H16N4O2	12.67	1.14	12	16	4
222	C17H4N	18.82	1.67	17	4	1	224	C11H14NO4	12.65	1.54	11	14	1
222	C18H6	19.55	1.81	18	6	0	224	C11H16N2O3	13.02	1.38	11	16	2
							224	C11N2O4	12.81	1.56	11	0	2
223	C10H11N2O4	11.90	1.45	10	11	2	224	C11H18N3O2	13.40	1.23	11	18	3



224	C11H18N3O2	13.40	1.23	11	18	3	225	C11H19N3O2	13.41	1.23	11	19	3
224	C11H2N3O3	13.18	1.40	11	2	3	225	C11H3N3O3	13.2	1.41	11	3	3
224	C11H20N4O	13.77	1.08	11	20	4	225	C11H21N4O	13.79	1.08	11	21	4
224	C11H4N4O2	13.55	1.25	11	4	4	225	C11H5N4O2	13.57	1.25	11	5	4
224	C12H16O4	13.38	1.63	12	16	0	225	C12H17O4	13.4	1.63	12	17	0
224	C12H18NO3	13.75	1.48	12	18	1	225	C12H19NO3	13.77	1.48	12	19	1
224	C12H2NO4	13.54	1.65	12	2	1	225	C12H3NO4	13.55	1.65	12	3	1
224	C12H20N2O2	14.13	1.33	12	20	2	225	C12H21N2O2	14.14	1.33	12	21	2
224	C12H4N2O3	13.91	1.50	14	4	2	225	C12H5N2O3	13.93	1.5	12	5	2
224	C12H22N3O	14.50	1.18	12	22	3	225	C12H23N3O	14.52	1.18	12	23	3
224	C12H6N3O2	14.29	1.35	12	6	3	225	C12H7N3O2	14.3	1.35	12	7	3
224	C12H24N4	14.88	1.03	12	24	4	225	C12H25N4	14.89	1.04	12	25	4
224	C13H8N4O	14.66	1.20	13	8	4	225	C12H9N4O	14.68	1.2	12	9	4
224	C13H20O3	14.49	1.57	13	20	0	225	C13H21O3	14.5	1.58	13	21	0
224	C13H4O4	14.27	1.74	13	4	0	225	C13H5O4	14.28	1.75	13	5	0
224	C13H22NO2	14.86	1.43	13	22	1	225	C13H23NO2	14.88	1.43	13	23	1
224	C13H6NO3	14.64	1.60	13	6	1	225	C13H7NO3	14.66	1.6	13	7	1
224	C13H24N2O	15.23	1.28	13	24	2	225	C13H25N2O	15.25	1.29	13	25	2
224	C13H8N2O2	15.02	1.45	13	8	2	225	C13H9N2O2	15.03	1.45	13	9	2
224	C13H26N3	15.61	1.14	13	26	3	225	C13H27N3	15.62	1.14	13	27	3
224	C13H10N3O	15.39	1.31	13	10	3	225	C13H11N3O	15.41	1.31	13	11	3
224	C13H12N4	15.77	1.16	13	12	4	225	C13H13N4	15.78	1.17	13	13	4
224	C14H24O2	15.59	1.53	14	24	0	225	C14H25O2	15.61	1.54	14	25	0
224	C14H8O3	15.37	1.70	14	8	0	225	C14H9O3	15.39	1.7	14	9	0
224	C14H26NO	15.97	1.39	14	26	1	225	C14H27NO	15.98	1.39	14	27	1
224	C14H10NO2	15.75	1.56	14	10	1	225	C14H11NO2	15.76	1.56	14	11	1
224	C14H28N2	16.34	1.25	14	28	2	225	C14H29N2	16.36	1.25	14	29	2
224	C14H12N2O	16.12	1.42	14	12	2	225	C14H13N2O	16.14	1.42	14	13	2
224	C14H14N3	16.50	1.28	14	14	3	225	C14H15N3	16.51	1.28	14	15	3
224	C14N4	16.65	1.30	14	0	4	225	C14HN4	16.67	1.3	14	1	4
224	C15H28O	16.70	1.51	15	28	0	225	C15H29O	16.71	1.51	15	29	0
224	C15H12O2	16.48	1.67	15	12	0	225	C15H13O2	16.5	1.67	15	13	0
224	C15H30N	17.07	1.37	16	30	1	225	C15H31N	17.09	1.37	15	31	1
224	C15H14NO	16.85	1.53	15	14	1	225	C15H15NO	16.87	1.54	15	15	1
224	C15H16N2	17.23	1.39	15	16	2	225	C15H17N2	17.24	1.4	15	17	2
224	C15N2O	17.01	1.56	15	0	2	225	C15HN2O	17.03	1.56	15	1	2
224	C15H2N3	17.39	1.42	15	2	3	225	C15H3N3	17.4	1.42	15	3	3
224	C16H32	17.80	1.49	16	32	0	225	C16H33	17.82	1.49	16	33	0
224	C16H16O	17.58	1.65	16	16	0	225	C16H17O	17.6	1.66	16	17	0
224	C16O2	17.37	1.82	16	0	2	225	C16HO2	17.38	1.82	16	1	0
224	C16H18N	17.96	1.52	16	18	1	225	C16H19N	17.98	1.52	16	19	1
224	C16H2NO	17.74	1.68	16	2	1	225	C16H3NO	17.76	1.68	16	3	1
224	C16H4N2	18.12	1.55	16	4	2	225	C16H5N2	18.13	1.55	16	5	2
224	C17H20	18.69	1.65	17	20	0	225	C17H21	18.71	1.65	17	21	0
224	C17H4O	18.47	1.81	17	4	0	225	C17H5O	18.49	1.81	17	5	0
224	C17H6N	18.85	1.68	17	6	1	225	C17H7N	18.86	1.68	17	7	1
224	C18H8	19.58	1.81	18	8	0	225	C18H9	19.59	1.81	18	9	0
225	C10H13N2O4	11.93	1.45	10	13	2	226	C10H14N2O4	11.95	1.46	10	14	2
225	C10H15N3O3	12.31	1.3	10	15	3	226	C10H16N3O3	12.2	1.3	10	16	3
225	C10H17N4O2	12.68	1.14	10	17	4	226	C10H18N4O2	12.7	1.15	10	18	4
225	C11H15NO4	12.66	1.54	11	15	1	226	C11H16NO4	12.68	1.54	11	16	1
225	C11H17N2O3	13.04	1.39	11	17	2	226	C11H18N2O3	13.05	1.39	11	18	2
225	C11HN2O4	12.82	1.56	11	1	2	226	C11H2N2O4	12.84	1.56	11	2	2

226	C11H20N3O2	13.43	1.24	11	20	3	227	C11H19N2O3	13.07	1.39	11	19	2
226	C11H4N3O3	13.21	1.41	11	4	3	227	C11H3N2O4	12.85	1.56	11	3	2
226	C11H22N4O	13.8	1.09	11	22	4	227	C11H21N3O2	13.45	1.24	11	21	3
226	C11H6N4O2	13.59	1.26	11	6	4	227	C11H5N3O3	13.23	1.41	11	5	3
226	C12H18O4	13.41	1.63	12	18	0	227	C11H23N4O	13.82	1.09	11	23	4
226	C12H20NO3	13.79	1.48	12	20	1	227	C11H7N4O2	13.6	1.26	11	7	4
226	C12H4NO4	13.57	1.65	12	4	1	227	C12H19O4	13.43	1.63	12	19	0
226	C12H22N2O2	14.16	1.33	12	22	2	227	C12H21NO3	13.8	1.48	12	21	1
226	C12H6N2O3	13.94	1.5	12	6	2	227	C12H5NO4	13.59	1.65	12	5	1
226	C12H24N3O	14.53	1.18	12	24	3	227	C12H23N2O2	14.18	1.33	12	23	2
226	C12H8N3O2	14.32	1.35	12	8	3	227	C12H7N2O3	13.96	1.5	12	7	2
226	C12H26N4	14.91	1.04	12	26	4	227	C12H25N3O	14.55	1.19	12	25	3
226	C12H10N4O	14.69	1.21	12	10	4	227	C12H9N3O2	14.33	1.36	12	9	3
226	C13H22O3	14.52	1.58	13	22	0	227	C12H27N4	14.93	1.04	12	27	4
226	C13H6O4	14.3	1.75	13	6	0	227	C12H11N4O	14.71	1.21	12	11	4
226	C13H24NO2	14.89	1.43	13	24	1	227	C13H23O3	14.53	1.58	13	23	0
226	C13H8NO3	14.67	1.6	13	8	1	227	C13H7O4	14.32	1.75	13	7	0
226	C13H26N2O	15.27	1.29	13	26	2	227	C13H25NO2	14.91	1.44	13	25	1
226	C13H10N2O2	15.05	1.46	13	10	2	227	C13H9NO3	14.69	1.6	13	9	1
226	C13H28N3	15.64	1.14	13	28	3	227	C13H27N2O	15.28	1.29	13	27	2
226	C13H12N3O	15.42	1.31	13	13	3	227	C13H11N2O2	15.06	1.46	13	11	2
226	C13H14N4	15.8	1.17	13	14	4	227	C13H29N3	15.66	1.15	13	29	3
226	C14H26O2	15.62	1.54	14	26	0	227	C13H13N3O	15.44	1.31	13	13	3
226	C14H10O3	15.41	1.71	14	10	0	227	C13H15N4	15.81	1.17	13	15	4
226	C14H28NO	16	1.4	14	28	1	227	C14H27O2	15.64	1.54	14	27	0
226	C14H10O3	15.87	1.56	14	10	0	227	C14H11O3	15.42	1.71	14	11	0
226	C14H30N2	16.37	1.26	14	30	2	227	C14H29NO	16.01	1.4	14	29	1
226	C14H14N2O	16.15	1.42	14	14	2	227	C14H13NO2	15.8	1.57	14	13	1
226	C14H16N3	16.53	1.28	14	16	3	227	C14H31N2	16.39	1.26	14	31	2
226	C14N3O	16.31	1.45	14	0	3	227	C14H15N2O	16.17	1.42	14	15	2
226	C14H2N4	16.69	1.31	14	2	4	227	C14H17N3	16.54	1.28	14	17	3
226	C15H30O	16.73	1.51	15	30	0	227	C14HN3O	16.33	1.45	14	1	3
226	C15H14O2	16.51	1.68	15	14	0	227	C14H3N4	16.7	1.31	14	3	4
226	C15H32N	17.1	1.37	15	32	1	227	C15H31O	16.74	1.51	15	31	0
226	C15H16NO	16.89	1.54	15	16	1	227	C15H15O2	16.53	1.68	15	15	0
226	C15NO2	16.67	1.7	15	0	1	227	C15H33N	17.12	1.38	15	33	1
226	C15H28N2	17.26	1.4	15	28	2	227	C15H17NO	16.9	1.54	15	17	1
226	C15H2N2O	17.04	1.56	15	2	2	227	C15HNO2	16.68	1.7	15	1	1
226	C15H4N3	17.42	1.43	15	4	3	227	C15H19N2	17.28	1.4	15	19	2
226	C16H34	17.83	1.5	16	34	0	227	C15H3N2O	17.06	1.57	15	3	2
226	C16H18O	17.62	1.66	16	18	0	227	C16H19O	17.63	1.66	16	19	0
226	C18H2O2	17.4	1.82	18	2	0	227	C16H3O2	17.42	1.82	16	3	0
226	C18H20N	17.99	1.52	18	20	1	227	C16H21N	18.01	1.53	16	21	1
226	C16H4NO	17.77	1.69	16	4	1	227	C16H5NO	17.79	1.69	16	5	1
226	C16H6N2	18.15	1.55	16	6	2	227	C16H7N2	18.16	1.55	16	7	2
226	C17H22	18.72	1.65	17	22	0	227	C17H23	18.74	1.66	17	23	0
226	C17H6O	18.51	1.81	17	6	0	227	C17H7O	18.52	1.82	17	7	0
226	C17H8N	18.88	1.68	17	8	1	227	C17H9N	18.9	1.69	17	9	1
226	C18H10	19.61	1.82	18	10	0	227	C18H11	19.63	1.82	18	11	0
227	C10H15N2O4	11.97	1.46	10	15	2	228	C10H16N2O4	11.98	1.46	10	16	2
227	C10H17N3O3	12.34	1.3	10	17	3	228	C10H18N3O3	12.36	1.3	10	18	3
227	C11H19N4O2	12.71	1.15	11	19	4	228	C10H20N4O2	12.73	1.15	10	20	4
227	C11H17NO4	12.7	1.54	11	17	1	228	C11H18NO4	12.71	1.54	11	18	1

228	C11H20N2O3	13.09	1.39	11	20	2	229	C10H17N2O4	12	1.46	10	17	2
228	C11H4N2O4	12.87	1.56	11	4	2	229	C10H19N3O3	12.37	1.31	10	19	3
228	C11H22N3O2	13.46	1.24	11	22	3	229	C10H21N4O2	12.75	1.15	10	21	4
228	C11H6N3O3	13.24	1.41	11	6	3	229	C11H19NO4	12.73	1.55	11	19	1
228	C11H24N4O	13.84	1.09	11	24	4	229	C11H21N2O3	13.1	1.39	11	21	2
228	C11H8N4O2	13.62	1.26	11	8	4	229	C11H5N2O4	12.89	1.57	11	5	2
228	C12H20O4	13.44	1.64	12	20	0	229	C11H23N3O2	13.48	1.24	11	23	3
228	C12H22NO3	13.82	1.49	10	22	1	229	C11H7N3O3	13.26	1.41	11	7	3
228	C12H6NO4	13.6	1.66	12	6	1	229	C11H25N4O	13.85	1.09	11	25	4
228	C12H24N2O2	14.19	1.34	12	24	2	229	C11H9N4O2	13.63	1.26	11	9	4
228	C12H8N2O3	13.98	1.51	12	8	2	229	C12H21O4	13.46	1.64	12	21	4
228	C12H26N3O	14.57	1.19	12	26	3	229	C12H23NO3	13.83	1.49	12	23	1
228	C12H10N3O2	14.35	1.36	12	10	3	229	C12H7NO4	13.62	1.66	12	7	1
228	C12H28N4	14.94	1.04	12	28	4	229	C12H25N2O2	14.21	1.34	12	25	2
228	C12H12N4O	14.72	1.21	12	12	4	229	C12H9N2O3	13.99	1.51	12	9	2
228	C13H24O3	14.55	1.58	13	24	0	229	C12H27N3O	14.58	1.19	12	27	3
228	C13H8O4	14.33	1.75	13	8	0	229	C12H11N3O2	14.37	1.36	12	11	3
228	C13H26NO2	14.92	1.44	13	26	1	229	C12H27N4	14.96	1.05	12	27	4
228	C13H10NO3	14.71	1.61	13	10	1	229	C12H13N4O	14.74	1.21	12	13	4
228	C13H28N2O	15.3	1.29	13	28	2	229	C13H25O3	14.57	1.59	13	25	0
228	C13H12N2O2	15.08	1.46	13	12	2	229	C13H9O4	14.35	1.76	13	9	0
228	C13H30N3	15.67	1.15	13	30	3	229	C13H27NO2	14.94	1.44	13	27	1
228	C13H14N3O	15.46	1.32	13	14	3	229	C13H11NO3	14.72	1.61	13	11	1
228	C13H16N4	15.83	1.17	13	16	4	229	C13H29N2O	15.31	1.3	13	29	2
228	C13N4O	15.61	1.34	13	0	4	229	C13H13N2O2	15.1	1.46	13	13	2
228	C14H28O2	15.65	1.54	14	28	0	229	C13H31N3	15.69	1.15	13	31	3
228	C14H12O3	15.44	1.71	14	12	0	229	C13H15N3O	15.47	1.32	13	15	3
228	C14H30NO	16.03	1.4	14	30	1	229	C13H17N4	15.85	1.18	13	17	4
228	C14H14NO2	15.81	1.57	14	14	1	229	C13HN4O	15.63	1.34	13	1	4
228	C14H32N2	16.4	1.26	14	32	2	229	C14H29O2	15.67	1.55	14	29	0
228	C14H16N2O	16.19	1.43	14	16	2	229	C14H13O3	15.45	1.71	14	13	0
228	C14N2O2	15.97	1.59	14	0	2	229	C14H31NO	16.05	1.41	14	31	1
228	C14H18N3	16.56	1.29	14	18	3	229	C14H15NO2	15.83	1.57	14	15	1
228	C14H2N3O	16.34	1.45	14	2	3	229	C14H17N2O	16.2	4.43	14	17	2
228	C14H4N4	16.72	1.31	14	4	4	229	C14HN2O2	15.99	1.6	14	1	2
228	C15H32O	16.76	1.52	15	32	0	229	C14H19N3	16.58	1.29	14	19	3
228	C15H16O2	16.54	1.68	15	16	0	229	C14H3N3O	16.36	1.45	14	3	3
228	C15O3	16.33	1.85	15	0	0	229	C14H5N4	16.73	1.32	14	5	4
228	C15H18NO	16.92	1.54	15	18	1	229	C15H17O2	16.56	1.68	15	17	0
228	C15H2NO2	16.7	1.71	15	2	1	229	C15HO3	16.34	1.85	15	1	0
228	C15H20N2	17.29	1.41	15	20	2	229	C15H19NO	16.93	1.55	15	19	1
228	C15H4N2O	17.07	1.57	15	4	2	229	C15H3NO2	16.72	1.71	15	3	1
228	C15H6N3	17.45	1.43	15	6	3	229	C15H21N2	17.31	1.41	15	21	2
228	C16H20O	17.65	1.66	16	20	0	229	C15H5N2O	17.09	1.57	15	5	2
228	C16H4O2	17.43	1.83	16	4	0	229	C15H7N3	17.47	1.44	15	7	3
228	C16H22N	18.02	1.53	16	22	1	229	C16H21O	17.66	1.67	16	21	0
228	C16H6NO	17.81	1.69	16	6	1	229	C16H5O2	17.45	1.83	16	5	0
228	C16H8N2	18.18	1.56	16	8	2	229	C16H23N	18.04	1.53	16	23	1
228	C17H24	18.75	1.66	17	24	0	229	C16H7NO	17.82	1.69	16	7	1
228	C17H8O	18.54	1.82	17	8	0	229	C16H9N2	18.2	1.56	16	9	2
228	C17H10N	18.91	1.69	17	10	1	229	C17H25	18.77	1.66	17	25	0
228	C18H12	19.64	1.82	18	12	0	229	C17H9O	18.55	1.82	17	9	0
228	C19	20.53	2	19	0	0	229	C17H11N	18.93	1.69	17	11	1
							229	C18H13	19.66	1.83	18	13	0

229	C19H	20.55	2	19	1	0	230	C17H12N	18.94	1.69	17	12	1
							230	C18H14	19.67	1.83	18	14	0
230	C10H18N2O4	12.01	1.46	10	18	2	230	C18N	19.83	1.86	18	0	1
230	C10H20N3O3	12.39	1.31	10	20	3	230	C19H2	20.56	2	19	2	0
230	C10H22N4O2	12.76	1.15	10	22	4							
230	C10H20NO4	12.74	1.55	10	20	1	231	C10H19N2O4	12.03	1.47	10	19	2
230	C11H22N2O3	13.12	1.4	11	22	2	231	C10H21N3O3	12.4	1.31	10	21	3
230	C11H6N2O4	12.9	1.57	11	6	2	231	C10H23N4O2	12.78	1.16	10	23	4
230	C11H24N3O2	13.49	1.24	11	24	3	231	C11H21NO4	12.76	1.55	11	21	1
230	C11H8N3O3	13.28	1.24	11	8	3	231	C11H23N2O3	13.13	1.4	11	23	2
230	C11H26N4O	13.87	1.09	11	26	4	231	C11H7N2O4	12.92	1.57	11	7	2
230	C11H10N4O2	13.65	1.27	11	10	4	231	C11H25N3O2	13.51	1.25	11	25	3
230	C12H22O4	13.48	1.64	12	22	0	231	C11H9N3O3	13.29	1.42	11	9	3
230	C12H24NO3	13.85	1.49	12	24	1	231	C11H27N4O	13.88	1.1	11	27	4
230	C12H8NO4	13.63	1.66	12	8	1	231	C11H11N4O2	13.67	1.27	11	11	4
230	C12H26N2O2	14.22	1.34	12	26	2	231	C12H23O4	13.49	1.64	12	23	0
230	C12H10N2O3	14.01	1.51	12	10	2	231	C12H25NO3	13.87	1.49	12	25	1
230	C12H28N3O	14.6	1.19	12	28	3	231	C12H9NO4	13.65	1.66	12	9	1
230	C12H12N3O2	14.38	1.36	12	12	3	231	C12H27N2O2	14.24	1.34	12	27	2
230	C12H30N4	14.97	1.05	12	30	4	231	C12H11N2O3	14.02	1.51	12	11	2
230	C12H14N4O	14.76	1.22	12	14	4	231	C12H29N3O	14.61	1.2	12	29	3
230	C13H26O3	14.58	1.59	13	26	0	231	C12H13N3O2	14.4	1.37	12	13	3
230	C13H10O4	14.36	1.76	13	10	0	231	C12H15N4O	14.77	1.22	12	15	4
230	C13H28NO2	14.96	1.44	13	28	1	231	C13H27O3	14.6	1.59	13	27	0
230	C13H12NO3	14.74	1.61	13	12	1	231	C13H11O4	14.38	1.76	13	11	0
230	C13H30N2O	15.33	1.3	13	30	2	231	C13H29NO2	14.97	1.45	13	29	1
230	C13H14N2O2	15.11	1.47	13	14	2	231	C13H13NO3	14.75	1.61	13	13	1
230	C13H16N3O	15.49	1.32	13	16	3	231	C13H15N2O2	15.13	1.47	13	15	2
230	C13N3O2	15.27	1.49	13	0	3	231	C13H17N3O	15.5	1.32	13	17	3
230	C13H18N4	15.86	1.18	13	18	4	231	C13HN3O2	15.29	1.49	13	1	3
230	C13H2N4O	15.64	1.35	13	2	4	231	C13H19N4	15.88	1.18	13	19	4
230	C14H30O2	15.69	1.55	14	3	0	231	C13H3N4O	15.66	1.35	13	3	4
230	C14H14O3	15.47	1.72	14	14	0	231	C14H15O3	15.49	1.72	14	15	0
230	C14H16NO2	15.84	1.57	14	16	1	231	C14H17NO2	15.86	1.58	14	17	1
230	C14NO3	15.63	1.74	14	0	1	231	C14HNO3	15.64	1.74	14	1	1
230	C14H18N2O	16.22	1.43	14	18	2	231	C14H19N2O	16.23	1.44	14	19	2
230	C14H2N2O2	16	1.6	14	2	2	231	C14H3N2O2	16.02	1.6	14	3	2
230	C14H20N3	16.59	1.29	14	20	3	231	C14H21N3	16.61	1.3	14	21	3
230	C14H4N3O	16.38	1.46	14	4	3	231	C14H5N3O	16.39	1.46	14	5	3
230	C14H6N4	16.75	1.32	14	6	4	231	C14H7N4	16.77	1.32	14	7	4
230	C15H18O2	16.58	1.69	15	18	0	231	C15H19O2	16.59	1.69	15	19	0
230	C15H20NO	16.36	1.85	15	20	1	231	C15H3O3	16.37	1.85	15	3	0
230	C15H4NO2	16.95	1.55	15	4	1	231	C15H21NO	16.97	1.55	15	21	1
230	C15H4NO2	16.73	1.71	15	4	1	231	C15H5NO2	16.75	1.72	15	5	1
230	C15H22N2	17.32	1.41	15	22	2	231	C15H23N2	17.34	1.41	15	23	2
230	C15H6N2O	17.11	1.57	15	6	2	231	C15H7N2O	17.12	1.58	15	7	2
230	C15H8N3	17.48	1.44	15	8	3	231	C15H9N3	17.5	1.44	15	9	3
230	C16H22O	17.68	1.67	16	22	0	231	C16H23O	17.7	1.67	16	23	0
230	C16H6O2	17.46	1.83	16	6	0	231	C16H7O2	17.48	1.84	16	7	0
230	C16H24N	18.06	1.54	16	24	1	231	C16H25N	18.07	1.54	16	25	1
230	C16H8NO	17.84	1.7	16	8	1	231	C16H9NO	17.85	1.7	16	9	1
230	C16H10N2	18.21	1.56	16	10	2	231	C16H11N2	18.23	1.57	16	11	2
230	C17H26	18.79	1.67	17	26	0	231	C17H27	18.8	1.67	17	27	0
230	C17H10O	18.57	1.83	17	10	0	231	C17H11O	18.59	1.83	17	11	0

231	C17H13N	18.96	1.7	17	13	0	232	C17H12O	18.6	1.83	17	12	0
231	C18H15	19.69	1.83	18	15	0	232	C17H14N	18.98	1.7	17	14	1
231	C18HN	19.85	1.86	18	1	1	232	C17N2	19.13	1.73	17	0	2
231	C19H3	20.58	2.01	19	3	0	232	C18H16	19.71	1.84	18	16	0
							232	C18O	19.49	1.99	18	0	0
232	C10H20N2O4	12.05	1.47	10	20	2	232	C18H2N	19.86	1.87	18	2	1
232	C10H22N3O3	12.42	1.31	10	22	3	232	C19H4	20.6	2.01	19	4	
232	C10H24N4O2	12.79	1.16	10	24	4							
232	C11H22NO4	12.78	1.55	11	22	1	233	C10H21N2O4	12.06	1.47	10	21	2
232	C11H24N2O3	13.15	1.4	11	24	2	233	C10H23N3O3	12.44	1.31	10	23	3
232	C11H8N2O4	12.93	1.57	11	8	2	233	C10H25N4O2	12.81	1.16	10	25	4
232	C11H26N3O2	13.53	1.25	11	26	3	233	C11H23NO4	12.79	1.56	11	23	1
232	C11H10N3O3	13.31	1.42	11	10	3	233	C11H25N2O3	13.17	1.4	11	25	2
232	C11H28N4O	13.9	1.1	11	28	4	233	C11H9N2O4	12.95	1.57	11	9	2
232	C11H12N4O2	13.68	1.27	11	12	4	233	C11H27N3O2	13.54	1.57	11	27	3
232	C12H24O4	13.51	1.64	12	24	0	233	C11H11N3O3	13.32	1.42	11	11	3
232	C12H26NO3	13.88	1.49	12	26	1	233	C11H13N4O2	13.7	1.27	11	13	4
232	C12H10NO4	13.67	1.66	12	10	1	233	C12H25O4	13.52	1.65	12	25	0
232	C10H28N2O2	14.26	1.35	10	28	2	233	C12H27NO3	13.9	1.5	12	27	1
232	C12H12N2O3	14.04	1.52	12	12	2	233	C12H11NO4	13.68	1.67	12	11	1
232	C12H14N3O2	14.41	1.37	12	14	3	233	C12H13N2O3	14.06	1.52	12	13	2
232	C12H16N4O	14.79	1.22	12	16	4	233	C12H15N3O2	14.43	1.37	12	15	3
232	C12N4O2	14.57	1.39	12	0	4	233	C12H17N4O	14.8	1.22	12	17	4
232	C13H28O3	14.61	1.59	13	28	0	233	C12HN4O2	14.59	1.39	12	1	4
232	C13H12O4	14.4	1.76	13	12	0	233	C13H13O4	14.41	1.76	13	13	0
232	C13H14NO3	14.77	1.62	13	14	1	233	C13H15NO3	14.79	1.62	13	15	1
232	C13H16N2O2	15.14	1.47	13	16	2	233	C13H17N2O2	15.16	1.47	13	17	2
232	C13N2O3	14.93	1.64	13	0	2	233	C13HN2O3	14.94	1.64	13	1	2
232	C13H18N3O	15.52	1.33	13	18	3	233	C13H19N3O	15.54	1.33	13	19	3
232	C13H2N3O2	15.3	1.49	13	2	3	233	C13H3N3O2	15.32	1.5	13	3	3
232	C13H20N4	15.89	1.18	13	20	4	233	C12H21N4	15.91	1.19	12	21	4
232	C13H4N4O	15.68	1.35	13	4	4	233	C13H5N4O	15.69	1.35	13	5	4
232	C14H16O3	15.5	1.72	14	16	0	233	C14H17O3	15.52	1.72	14	17	0
232	C14O4	15.28	1.89	14	0	0	233	C14HO4	15.3	1.89	14	1	0
232	C14H18NO2	15.88	1.58	14	18	1	233	C14H19NO2	15.89	1.58	14	19	1
232	C14H2NO3	15.66	1.74	14	2	1	233	C14H3NO3	15.68	1.75	14	3	1
232	C14H20N2O	16.25	1.44	14	20	1	233	C14H21N2O	16.27	1.44	14	21	2
232	C14H4N2O2	16.03	1.6	14	4	2	233	C14H5N2O2	16.05	1.61	14	5	2
232	C14H22N3	16.62	1.3	14	22	3	233	C14H23N3	16.64	1.3	14	23	3
232	C14H6N3O	16.41	1.46	14	6	3	233	C14H7N3O	16.42	1.47	14	7	3
232	C14H8N4	16.78	1.32	14	8	4	233	C14H9N4	16.8	1.33	14	9	4
232	C15H20O2	16.61	1.69	15	20	0	233	C15H21O2	16.62	1.7	15	21	0
232	C15H4O3	16.39	1.86	15	4	0	233	C15H5O3	16.41	1.86	15	5	0
232	C15H22NO	16.98	1.55	15	22	1	233	C15H23NO	17	1.56	15	23	1
232	C15H6NO2	16.76	1.72	15	6	1	233	C15H7NO2	16.78	1.72	15	7	1
232	C15H24N2	17.36	1.42	15	24	2	233	C15H25N2	17.37	1.42	15	25	2
232	C15H8N2O	17.14	1.58	15	8	2	233	C15H9N2O	17.16	1.58	15	9	2
232	C15H10N3	17.51	1.44	15	10	3	233	C15H11N3	17.53	1.45	15	11	3
232	C16H24O	17.71	1.68	16	24	0	233	C16H25O	17.73	1.68	16	25	0
232	C16H8O2	17.5	1.84	16	8	0	233	C16H9O2	17.51	1.84	16	9	0
232	C16H26N	18.09	1.54	16	26	1	233	C16H27N	18.1	1.54	16	27	1
232	C16H10NO	17.87	1.7	16	10	1	233	C16H11NO	17.89	1.71	16	11	1
232	C16H12N2	18.24	1.57	16	12	2	233	C16H13N2	18.26	1.57	16	13	2
232	C17H28	18.82	1.67	17	28	0	233	C17H29	18.83	1.67	17	29	0

233	C17H13O	18.62	1.83	17	13	0	234	C17H30	18.85	1.68	17	30	0
233	C17H15N	18.99	1.7	17	15	1	234	C17H14O	18.63	1.84	17	14	0
233	C17HN2	19.15	1.73	17	1	2	234	C17H16N	19.01	1.71	17	16	1
233	C18H17	19.72	1.84	18	17	0	234	C17NO	18.79	1.87	17	0	1
233	C18HO	19.51	2	18	1	0	234	C17H2N2	19.17	1.74	17	2	2
233	C18H3N	19.88	1.87	18	3	1	234	C18H18	19.74	1.84	18	18	0
233	C19H5	20.61	2.01	19	5	0	234	C18H2O	19.52	2	18	2	0
							234	C18H4N	19.9	1.87	18	4	1
234	C10H22N2O4	12.08	1.47	10	22	2	234	C19H6	20.63	2.02	19	6	0
234	C10H24N3O3	12.45	1.32	10	24	3							
234	C10H26N4O2	12.83	1.16	10	26	4	235	C10H23N2O4	12.09	1.47	10	23	2
234	C11H24NO4	12.81	1.56	11	24	1	235	C10H25N3O3	12.47	1.32	10	25	3
234	C11H26N2O3	13.18	1.4	11	26	2	235	C11H25NO4	12.82	1.56	11	25	2
234	C11H10N2O4	12.97	1.58	11	10	2	235	C11H11N2O4	12.98	1.58	11	11	2
234	C11H12N3O3	13.34	1.42	12	12	3	235	C11H13N3O3	13.36	1.43	11	13	3
234	C11H14N4O2	13.71	1.27	11	14	4	235	C11H15N4O2	13.73	1.28	11	15	4
234	C12H26O4	13.54	1.65	12	26	0	235	C12H13NO4	13.71	1.67	12	13	1
234	C12H12NO4	13.7	1.67	12	12	1	235	C12H15N2O3	14.09	1.52	12	15	2
234	C12H14N2O3	14.07	1.52	12	14	2	235	C12H17N3O2	14.46	1.37	12	17	3
234	C12H16N3O2	14.45	1.37	12	16	3	235	C12HN3O3	14.24	1.54	12	1	3
234	C12N3O3	14.23	1.54	12	0	3	235	C12H19N4O	14.84	1.23	12	19	4
234	C12H18N4O	14.82	1.23	12	18	4	235	C12H3N4O2	14.62	1.4	12	3	4
234	C12H2N4O2	14.6	1.39	12	2	4	235	C13H15O4	14.44	1.77	13	15	0
234	C13H14O4	14.43	1.77	13	14	0	235	C13H17NO3	14.82	1.62	13	17	1
234	C13H16NO3	14.8	1.62	13	16	1	235	C13HNO4	14.6	1.79	13	1	1
234	C13NO4	14.59	1.79	13	0	1	235	C13H19N2O2	15.19	1.48	13	19	2
234	C13H18N2O2	15.18	1.48	13	18	2	235	C13H3N2O3	14.98	1.65	13	3	2
234	C13H2N2O3	14.96	1.64	13	2	2	235	C13H21N3O	15.57	1.33	13	21	3
234	C13H20N3O	15.55	1.33	13	20	3	235	C13H5N3O2	15.35	1.5	13	5	3
234	C13H4N3O2	15.33	1.5	13	4	3	235	C13C13H23N4	15.94	1.19	13	23	4
234	C13H22N4	15.93	1.19	13	22	4	235	C13H7N4O	15.72	1.36	13	7	4
234	C13H6N4O	15.71	1.36	13	6	4	235	C14H19O3	15.55	1.73	14	19	0
234	C14H18O3	15.53	1.73	14	18	0	235	C14H3O4	15.33	1.9	14	3	0
234	C14H2O4	15.32	1.89	14	2	0	235	C14H21NO2	15.92	1.59	14	21	1
234	C14H20NO2	15.91	1.58	14	20	1	235	C14H5NO3	15.71	1.75	14	5	1
234	C14H4NO3	15.69	1.75	14	4	1	235	C14H23N2O	16.3	1.45	14	23	2
234	C14H22N2O	16.28	1.44	14	22	2	235	C14H7N2O2	16.08	1.61	14	7	2
234	C14H6N2O2	16.07	1.61	14	6	2	235	C14H25N3	16.67	1.31	14	25	3
234	C14H24N3	16.66	1.3	14	24	3	235	C14H9N3O	16.46	1.47	14	9	3
234	C14H8N3O	16.44	1.47	14	8	3	235	C14H11N4	16.83	1.33	14	11	4
234	C14H10N4	16.81	1.33	14	10	4	235	C15H23O2	16.66	1.7	15	23	0
234	C15H22O2	16.64	1.7	15	22	0	235	C15H7O3	16.44	1.86	15	7	0
234	C15H6O3	16.42	1.86	15	6	0	235	C15H25NO	17.03	1.56	15	25	1
234	C15H24NO	17.01	1.56	15	24	1	235	C15H9NO2	16.81	1.73	15	9	1
234	C15H8NO2	16.8	1.72	15	8	1	235	C15H27N2	17.4	1.43	15	27	2
234	C15H26N2	17.39	1.42	15	26	2	235	C15H11N2O	17.19	1.59	15	11	2
234	C15H10N2O	17.17	1.59	15	10	2	235	C15H13N3	17.56	1.68	15	13	3
234	C15H12N3	17.55	1.45	15	12	3	235	C16H27O	17.76	1.68	16	27	0
234	C16H26O	17.74	1.68	16	26	0	235	C16H11O2	17.54	1.85	16	11	0
234	C16H10O2	17.53	1.84	16	10	0	235	C16H29N	18.14	1.55	16	29	1
234	C16H28N	18.12	1.55	16	28	1	235	C16H13NO	17.92	1.71	16	13	1
234	C16H12NO	17.9	1.71	16	12	1	235	C16H15N2	18.29	1.58	16	15	2
234	C16H14N2	18.28	1.58	16	14	2	235	C16HN3	18.45	1.61	16	1	3
234	C16N3	18.43	1.6	16	0	3	235	C17H31	18.87	1.68	17	31	0

235	C17H15O	18.65	1.84	17	15	0	236	C17H16O	18.67	1.84	17	16	0
235	C17H17N	19.02	1.71	17	17	1	236	C17O2	18.45	2	17	0	0
235	C17HNO	18.81	1.87	17	1	1	236	C17H18N	19.04	1.71	17	18	1
235	C17H3N2	19.18	1.74	17	3	2	236	C17H2NO	18.82	1.87	17	2	1
235	C18H19	19.75	1.85	18	19	0	236	C17H4N2	19.2	1.74	17	4	2
235	C18H3O	19.54	2	18	3	0	236	C18H2O	19.77	1.85	18	20	0
235	C18H5N	19.91	1.88	18	5	1	236	C18H4O	19.55	2.01	18	4	0
235	C19H7	20.64	2.02	19	7	0	236	C18H6N	19.93	1.88	18	6	1
							236	C19H8	20.66	2.02	19	8	0
236	C10H24N2O4	12.11	1.48	10	24	2	237	C11H13N2O4	13.01	1.58	11	13	2
236	C11H12N2O4	13	1.58	11	12	2	237	C11H15N3O3	13.39	1.43	11	15	3
236	C11H14N3O3	13.37	1.43	11	14	3	237	C11H17N4O2	13.76	1.28	11	17	4
236	C11H16N4O2	13.75	1.67	11	16	4	237	C12H15NO4	13.75	1.68	12	15	1
236	C12H14NO4	13.73	1.67	12	14	1	237	C12H17N2O3	14.12	1.53	12	17	2
236	C12H16N2O3	14.1	1.52	12	16	2	237	C12HN2O4	13.9	1.7	12	1	2
236	C12N2O4	13.89	1.69	12	0	2	237	C12H19N3O2	14.49	1.38	12	19	3
236	C12H18N3O2	14.48	1.38	12	18	3	237	C12H3N3O3	14.28	1.55	12	3	2
236	C12H2N3O3	14.26	1.55	12	2	3	237	C12H21N4O	14.87	1.23	12	21	4
236	C12H20N4O	14.85	1.23	12	20	4	237	C12H5N4O2	14.65	1.4	12	5	4
236	C12H4N4O2	14.64	1.4	12	4	4	237	C13H17O4	14.48	1.77	13	17	0
236	C13H16O4	14.46	1.4	13	16	0	237	C13H19NO3	14.85	1.63	13	19	1
236	C13H18NO3	14.83	1.63	13	18	1	237	C13H3NO3	14.63	1.8	13	3	1
236	C13H2NO4	14.62	1.79	13	2	1	237	C13H21N2O2	15.22	1.48	13	21	2
236	C13H20N2O2	15.21	1.48	13	20	2	237	C13H5N2O3	15.01	1.65	13	5	2
236	C13H4N2O3	14.99	1.65	13	4	2	237	C13H23N3O	15.6	1.34	13	23	3
236	C13H22N3O	15.58	1.34	13	22	3	237	C13H7N3O2	15.38	1.51	13	7	3
236	C13H6N3O2	15.37	1.5	13	6	3	237	C13H25N4	15.97	1.2	13	25	4
236	C13H24N4	15.96	1.19	13	24	4	237	C13H9N4O	15.76	1.36	13	9	4
236	C13H8N4O	15.74	1.36	13	8	4	237	C14H21O3	15.58	1.73	14	21	2
236	C14H20O3	15.57	1.73	14	20	0	237	C14H5O4	15.36	1.9	14	5	0
236	C14H4O4	15.35	1.9	14	4	0	237	C14H23NO2	15.96	1.59	14	23	1
236	C14H22NO2	15.94	1.59	14	22	1	237	C14H7NO3	15.74	1.76	14	7	1
236	C14H6NO3	15.72	1.76	14	6	1	237	C14H25N2O	16.33	1.45	14	25	2
236	C14H24N2O	16.31	1.45	14	24	2	237	C14H9N2O2	16.11	1.62	14	9	2
236	C14H8N2O2	16.1	1.61	14	8	2	237	C14H27N3	16.7	1.31	14	27	3
236	C14H26N3	16.69	1.31	14	26	3	237	C14H11N3O	16.49	1.48	14	11	3
236	C14H10N3O	16.47	1.47	14	10	3	237	C14H13N4	16.86	1.34	14	13	4
236	C14H12N4	16.85	1.33	14	12	4	237	C15H25O2	16.69	1.71	15	25	0
236	C15H24O2	16.67	1.7	15	24	0	237	C15H9O3	16.47	1.87	15	9	0
236	C15H8O3	16.45	1.87	15	8	0	237	C15H27NO	17.06	1.57	15	27	1
236	C15H26NO	17.05	1.56	15	26	1	237	C15H11NO2	16.84	1.73	15	11	1
236	C15H10NO2	16.83	1.73	15	10	1	237	C15H29N2	17.44	1.43	15	29	2
236	C15H28N2	17.42	1.43	15	28	2	237	C15H13N2O	17.22	1.59	15	13	2
236	C15H12N2O	17.2	1.59	15	12	2	237	C15H15N3	17.59	1.46	15	15	3
236	C15H14N3	17.58	1.46	15	14	3	237	C15HN4	17.75	1.48	15	1	4
236	C15N4	17.73	1.48	15	0	4	237	C16H29O	17.79	1.69	16	29	0
236	C16H28O	17.78	1.69	16	28	0	237	C16H13O2	17.58	1.85	16	13	0
236	C16H12O2	17.56	1.85	16	12	0	237	C16H31N	18.17	1.56	16	31	0
236	C16H30N	18.15	1.55	16	30	1	237	C16H15NO	17.95	1.72	16	15	1
236	C16H14NO	17.93	1.71	16	14	1	237	C16H17N2	18.32	1.58	16	17	2
236	C16H16N2	18.31	1.58	16	16	2	237	C16HN2O	18.11	1.75	16	1	2
236	C16N2O	18.09	1.74	16	0	2	237	C16H3N3	18.48	1.61	16	3	3
236	C16H2N3	18.47	1.61	16	2	3	237	C17H33	18.9	1.69	17	33	0
236	C17H32	18.88	1.68	17	32	0							

237	C17H17O	18.68	1.85	17	17	0	238	C16H4N3	18.5	1.62	16	4	3
237	C17HO2	18.46	2.01	17	1	0	238	C17H34	18.91	1.69	17	34	0
237	C17H19N	19.06	1.72	17	19	1	238	C17H18O	18.7	1.85	17	18	0
237	C17H3NO	18.84	1.87	17	3	1	238	C17H2O2	18.48	2.01	17	2	0
237	C17H5N2	19.21	1.75	17	5	2	238	C17H20N	19.07	1.72	17	20	1
237	C18H21	19.79	1.85	18	21	0	238	C17H4NO	18.85	1.88	17	4	1
237	C18H5O	19.57	2.01	18	5	0	238	C17H6N2	19.23	1.75	17	6	2
237	C18H7N	19.94	1.88	18	7	1	238	C18H22	19.8	1.86	18	22	0
237	C19H9	20.68	2.03	19	9	0	238	C18H6O	19.59	2.01	18	6	0
							238	C18H8N	19.96	1.89	18	8	1
238	C11H14N2O4	13.03	1.59	11	14	2	238	C19H10	20.69	2.03	19	10	0
238	C11H16N3O3	13.4	13.43	11	16	3							
238	C11H18N4O2	13.78	1.28	11	18	4	239	C11H15N2O4	13.05	1.59	11	15	2
238	C12H16NO4	13.76	1.68	12	16	1	239	C11H17N3O3	13.42	1.44	11	17	3
238	C12H18N2O3	14.14	1.53	12	18	2	239	C11H19N4O2	13.79	1.29	11	19	4
238	C12H2N2O4	13.92	1.7	12	2	2	239	C12H17NO4	13.78	1.68	12	17	1
238	C12H20N3O2	14.51	1.38	12	20	3	239	C12H19N2O3	14.15	1.53	12	19	2
238	C12H4N3O3	14.29	1.55	12	4	3	239	C12H3N2O4	13.93	1.7	12	3	2
238	C12H22N4O	14.88	1.24	12	22	4	239	C12H21N3O2	14.53	1.7	12	21	3
238	C12H6N4O2	14.67	1.4	12	6	4	239	C12H5N3O3	14.31	1.55	12	5	3
238	C13H18O4	14.49	1.78	13	18	0	239	C12H23N4O	14.9	1.24	12	23	4
238	C13H20NO3	14.87	1.63	13	20	1	239	C12H7N4O2	14.68	1.41	12	7	4
238	C13H4NO4	14.65	1.8	13	4	1	239	C13H19O4	14.51	1.78	13	19	0
238	C13H22N2O2	15.24	1.48	13	22	2	239	C13H21NO3	14.88	1.63	13	21	1
238	C13H6N2O3	15.02	1.65	13	6	2	239	C13H5NO4	14.67	1.78	13	5	1
238	C13H24N3O	15.62	1.34	13	24	3	239	C13H23N2O2	15.26	1.49	13	23	2
238	C13H8N3O2	15.4	1.51	13	8	3	239	C13H7N2O3	15.04	1.66	13	7	2
238	C13H26N4	15.99	1.2	13	26	4	239	C13H25N3O	15.63	1.34	13	25	3
238	C13H10N4O	15.77	1.37	13	10	4	239	C13H9N3O2	15.41	1.51	13	9	3
238	C14H22O3	15.6	1.74	14	22	0	239	C13H27N4	16.01	1.2	13	27	4
238	C14H6O4	15.38	1.9	14	6	0	239	C13H11N4O	15.79	1.37	13	11	4
238	C14H24NO2	15.97	1.59	14	24	1	239	C14H23O3	15.61	1.74	14	23	0
238	C14H8NO3	15.76	1.76	14	8	1	239	C14H7O4	15.40	1.92	14	7	0
238	C14H26N2O	16.35	1.45	14	26	2	239	C14H25NO2	15.99	1.60	14	25	1
238	C14H10N2O2	16.13	1.62	14	10	2	239	C14H9NO3	15.77	1.76	14	9	1
238	C14H28N3	16.72	1.31	14	28	3	239	C14H27N2O	16.36	1.46	14	27	2
238	C14H12N3O	16.5	1.48	14	12	3	239	C14H11N2O2	16.15	1.62	14	11	2
238	C14H14N4	16.88	1.34	14	14	4	239	C14H29N3	16.74	1.32	14	29	3
238	C15H26O2	16.7	1.71	15	26	0	239	C14H13N3O	16.52	1.48	14	13	3
238	C15H10O3	16.49	1.87	15	10	0	239	C14H15N4	16.89	1.34	14	15	4
238	C15H28NO	17.08	1.57	15	28	1	239	C15H27O2	16.72	1.71	15	27	0
238	C15H12NO2	16.86	1.73	15	12	1	239	C15H11O3	16.50	1.88	15	11	0
238	C15H30N2	17.45	1.43	15	30	2	239	C15H29NO	17.09	1.57	15	29	1
238	C15H14N2O	17.24	1.6	15	14	2	239	C15H13NO2	16.88	1.74	15	13	1
238	C15H16N3	17.61	1.46	15	16	3	239	C15H31N2	17.47	1.44	15	31	2
238	C15N3O	17.39	1.62	15	0	3	239	C15H15N2O	17.25	1.60	15	15	2
238	C15H2N4	17.77	1.49	15	2	4	239	C15H17N3	17.63	1.46	15	17	3
238	C16H30O	17.81	1.69	16	30	0	239	C15HN3O	17.41	1.63	15	1	3
238	C16H14O2	17.59	1.85	16	14	0	239	C15H3N4	17.78	1.49	15	3	4
238	C16H32N	18.18	1.56	16	32	1	239	C16H31O	17.82	1.70	16	31	0
238	C16H16NO	17.97	1.72	16	16	1	239	C16H15O2	17.61	1.86	16	15	0
238	C16NO2	17.75	1.88	16	0	1	239	C16H33N	18.20	1.56	16	33	1
238	C16H18N2	18.34	1.59	16	18	2	239	C16H17NO	17.98	1.72	16	17	1
238	C16H2N2O	18.12	1.75	16	2	2	239	C16HNO2	17.77	1.88	16	1	1



239	C16H19N2	18.36	1.59	16	19	2	240	C16O3	17.41	2.02	16	0	0
239	C16H3N2O	18.14	1.75	16	3	2	240	C16H34N	18.22	1.56	16	34	1
239	C16H5N3	18.51	1.62	16	5	3	240	C16H18NO	18.00	1.73	16	18	1
239	C17H35	18.93	1.69	17	35	0	240	C16H2NO2	17.78	1.89	16	2	1
239	C17H19O	18.71	1.85	17	19	0	240	C16H20N2	18.37	1.59	16	20	2
239	C17H3O2	18.50	2.01	17	3	0	240	C16H4N2O	18.16	1.75	16	4	2
239	C17H21N	19.09	1.72	17	21	1	240	C16H6N3	18.53	1.62	16	6	3
239	C17H5NO	18.87	1.88	17	5	1	240	C17H36	18.95	1.70	17	36	0
239	C17H7N2	19.25	1.75	17	7	2	240	C17H20O	18.73	1.86	17	20	0
239	C18H23	19.82	1.86	18	23	0	240	C17H4O2	18.51	2.02	17	4	0
239	C18H9N	19.98	1.89	18	9	1	240	C17H22N	19.10	1.72	17	22	1
239	C19H11	20.71	2.03	19	11	0	240	C17H6NO	18.89	1.88	17	6	1
							240	C17H8N2	19.29	1.75	17	8	2
240	C11H16N2O4	13.06	1.59	11	16	2	240	C18H24	18.83	1.86	18	24	0
240	C11H18N3O3	13.44	1.44	11	18	3	240	C18H8O	19.62	2.02	18	8	0
240	C11H20N4O2	13.81	1.29	11	20	4	240	C18H10N	19.99	1.89	18	10	1
240	C12H18NO4	13.79	1.68	12	18	1	240	C19H12	20.72	2.22	19	12	0
240	C12H20N2O3	14.17	1.53	12	20	2	240	C20	21.61	2.22	20	0	0
240	C12H4N2O4	13.95	1.70	12	4	2							
240	C12H22N3O2	14.54	1.39	12	22	3	241	C11H17N2O4	13.08	1.59	11	17	2
240	C12H6N3O3	14.32	1.56	12	6	3	241	C11H19N3O3	13.45	1.44	11	19	3
240	C12H24N4O	14.92	1.24	12	24	4	241	C11H21N4O2	13.83	1.29	11	21	4
240	C12H8N4O2	14.70	1.41	12	8	4	241	C12H19NO4	13.81	1.68	12	19	1
240	C13H20O4	14.52	1.78	13	20	0	241	C12H21N2O3	14.18	1.54	12	21	2
240	C13H22NO3	14.90	1.63	13	22	1	241	C12H5N2O4	13.97	1.71	12	5	2
240	C13H6NO4	14.68	1.80	13	6	1	241	C12H23N3O2	14.56	1.39	12	23	3
240	C13H24N2O2	15.27	1.49	13	24	2	241	C12H7N3O3	14.34	1.56	12	7	3
240	C13H8N2O3	15.06	1.66	13	8	2	241	C12H25N4O	14.93	1.24	12	25	4
240	C13H26N3O	15.65	1.35	13	26	3	241	C12H9N4O2	14.72	1.41	12	9	4
240	C13H10N3O2	15.43	1.51	13	10	3	241	C13H21O4	14.54	1.78	13	21	0
240	C13H28N4	16.02	1.20	13	28	4	241	C13H23NO3	14.91	1.64	13	23	1
240	C13H12N4O	15.80	1.37	13	12	4	241	C13H7NO4	14.70	1.81	13	7	1
240	C14H24O3	15.63	1.74	14	24	0	241	C13H25N2O2	15.29	1.49	13	25	2
240	C14H8O4	15.41	1.91	14	8	0	241	C13H9N2O3	15.09	1.66	13	9	2
240	C14H26NO2	16.00	1.60	14	26	1	241	C13H27N3O	15.66	1.35	13	27	3
240	C14H10NO3	15.79	1.77	14	10	1	241	C13H11N3O2	15.45	1.52	13	11	3
240	C14H28N2O	16.36	1.46	14	28	2	241	C13H29N4	16.04	1.21	13	29	4
240	C14H12N2O2	16.16	1.62	14	12	2	241	C13H13N4O	15.82	1.37	13	13	4
240	C14H30N3	16.75	1.32	14	30	3	241	C14H25O3	15.65	1.74	14	25	0
240	C14H14N3O	16.54	1.48	14	14	3	241	C14H9O4	15.43	1.91	14	9	0
240	C14H16N4	16.91	1.35	14	16	4	241	C14H27NO2	16.02	1.60	14	27	1
240	C14N4O	16.69	1.51	14	4	0	241	C14H11NO3	15.80	1.77	14	11	1
240	C15H28O2	16.74	1.71	15	28	0	241	C14H29N2O	16.39	1.46	14	29	2
240	C15H12O3	16.52	1.88	15	12	0	241	C14H13N2O2	16.18	1.63	14	13	2
240	C15H30NO	17.11	1.58	15	30	1	241	C14H31N3	16.77	1.32	14	31	3
240	C15H14NO2	16.89	1.74	15	14	1	241	C14H15N3O	16.55	1.49	14	15	3
240	C15H32N2	17.48	1.44	15	32	2	241	C14H17N4	16.93	1.35	14	17	4
240	C15H16N2O	17.27	1.60	15	16	2	241	C14HN4O	16.71	1.51	14	1	4
240	C15N2O2	17.05	1.77	15	0	2	241	C15H29O2	16.75	1.72	15	29	0
240	C15H18N3	17.64	1.47	15	18	3	241	C15H13O3	16.53	1.88	15	13	0
240	C15H2N3O	17.42	1.63	15	2	3	241	C15H31NO	17.13	1.58	15	31	1
240	C15H4N4	17.80	1.49	15	4	4	241	C15H15NO2	16.91	1.74	15	15	1
240	C16H32O	17.84	1.70	16	32	0	241	C15H33N2	17.50	1.44	15	33	2
240	C16H16O2	17.62	1.86	16	16	0	241	C15H17N2O	17.28	1.60	15	17	2

241	C15HN2O2	17.07	1.77	15	1	2	242	C15H30O2	16.77	1.72	15	30	0
241	C15H19N3	17.66	1.46	15	19	3	242	C15H14O3	16.55	1.88	15	14	0
241	C15H3N3O	17.44	1.63	15	3	3	242	C15H32NO	17.14	1.58	15	32	1
241	C15H5N4	17.81	1.50	15	5	4	242	C15H16NO2	16.92	1.74	15	16	1
241	C16H33O	17.86	1.70	16	33	0	242	C15NO3	16.71	1.91	15	0	1
241	C16H17O2	17.64	1.86	16	16	0	242	C15H34N2	17.52	1.44	15	34	2
241	C16HO3	17.42	2.03	16	1	0	242	C15H18N2O	17.3	1.61	15	18	2
241	C16H35N	18.23	1.57	16	35	1	242	C15H2N2O2	17.08	1.77	15	2	2
241	C16H19NO	18.01	1.73	16	19	1	242	C15H20N3	17.67	1.47	15	20	3
241	C16H3NO2	17.80	1.89	16	3	1	242	C15H4N3O	17.46	1.63	15	4	3
241	C16H21N2	18.39	1.60	16	21	2	242	C15H6N4	17.83	1.5	15	6	4
241	C16H5N2O	18.17	1.76	16	5	2	242	C16H34O	17.87	1.7	16	34	0
241	C16H7N3	18.55	1.62	16	7	3	242	C16H18O2	17.66	1.87	16	18	0
241	C17H21O	18.75	1.86	17	21	0	242	C16H2O3	17.44	2.03	16	2	0
241	C17H5O2	18.53	2.02	17	5	0	242	C16H20NO	18.03	1.73	16	20	1
241	C17H23N	19.12	1.73	17	23	1	242	C16H4NO2	17.81	1.89	16	4	1
241	C17H7NO	18.80	1.89	17	7	1	242	C16H22N2	18.4	1.6	16	22	2
241	C17H9N2	19.28	1.76	17	9	2	242	C16H6N2O	18.19	1.76	16	6	2
241	C18H25	19.85	1.87	18	25	0	242	C16H8N3	18.56	1.63	16	8	3
241	C18H9O	19.63	2.02	18	9	0	242	C17H22O	18.76	1.86	17	22	0
241	C18H11N	20.01	1.90	18	11	1	242	C17H6O2	18.54	2.02	17	6	0
241	C19H13	20.74	2.04	19	13	0	242	C17H24N	19.14	1.73	17	24	1
241	C20H	21.63	2.22	20	1	0	242	C17H8NO	18.92	1.89	17	8	1
							242	C17H10N2	19.29	1.76	17	10	2
242	C11H18N2O4	13.09	1.59	11	18	2	242	C18H26	19.87	1.87	18	26	0
242	C11H20N3O3	13.43	1.44	11	20	3	242	C18H10O	19.65	2.03	18	10	0
242	C11H22N4O2	13.84	1.29	11	22	4	242	C18H12N	20.02	1.9	18	12	1
242	C12H20NO4	13.83	1.69	12	20	1	242	C19H14	20.76	2.04	19	14	0
242	C12H22N2O3	14.2	1.53	12	22	2	242	C19N	20.91	2.08	19	0	1
242	C12H6N2O4	13.98	1.71	12	6	2	242	C20H2	21.64	2.23	20	2	0
242	C12H24N3O2	14.57	1.39	12	24	3							
242	C12H8N3O3	14.36	1.56	12	8	3	243	C11H19N2O4	13.11	1.6	11	19	2
242	C12H26N4O	14.95	1.24	12	26	4	243	C11H21N3O3	13.48	1.44	11	21	3
242	C12H10N4O2	14.73	1.41	12	10	4	243	C11H23N4O2	13.86	1.29	11	23	4
242	C13H22O4	14.56	1.79	13	22	0	243	C12H21NO4	13.84	1.69	12	21	1
242	C13H24NO3	14.93	1.64	13	24	1	243	C12H23N2O3	14.22	1.54	12	23	2
242	C13H8NO4	14.71	1.81	13	8	1	243	C12H7N2O3	14	1.71	12	7	2
242	C13H26N2O2	15.3	1.49	13	26	2	243	C12H25N3O2	14.59	1.39	12	25	3
242	C13H10N2O3	15.09	1.66	13	10	2	243	C12H9N3O3	14.37	1.56	12	9	3
242	C13H28N3O	15.68	1.35	13	28	3	243	C12H27N4O	14.96	1.25	12	27	4
242	C13H12N3O2	15.46	1.52	13	12	3	243	C12H11N4O2	14.75	1.42	12	11	4
242	C13H30N4	16.05	1.21	13	30	4	243	C13H23O4	14.57	1.79	13	23	0
242	C13H14N4O	15.84	1.38	13	14	4	243	C13H25NO3	14.95	1.64	13	25	1
242	C14H26O3	15.66	1.75	14	26	0	243	C13H9NO4	14.73	1.81	13	9	1
242	C14H10O4	15.44	1.91	14	10	0	243	C13H27N2O2	15.32	1.5	13	27	2
242	C14H28NO2	16.04	1.6	14	28	1	243	C13H11N2O3	15.1	1.66	13	11	2
242	C14H12NO3	15.82	1.77	14	12	1	243	C13H29N3O	15.7	1.35	13	29	3
242	C14H30N2O	16.41	1.46	14	30	2	243	C13H13N3O2	15.48	1.52	13	13	3
242	C14H14N2O2	16.19	1.63	14	14	2	243	C13H31N4	16.07	1.21	13	31	4
242	C14H32N3	16.78	1.32	14	32	3	243	C13H15N4O	15.85	1.38	13	15	4
242	C14H16N3O	16.57	1.49	14	16	3	243	C14H27O3	15.68	1.75	14	27	0
242	C14N3O2	16.35	1.65	14	0	3	243	C14H11O4	15.46	1.92	14	11	0
242	C14H18N4	16.94	1.35	14	18	4	243	C14H29NO2	16.05	1.61	14	29	1
242	C14H2N4O	16.73	1.51	14	2	4	243	C14H13NO3	15.84	1.77	14	13	1

243	C14H31N2O	16.43	1.47	14	31	2	244	C13H16N4O	15.87	1.38	13	16	4
243	C14H15N2O2	16.21	1.63	14	15	2	244	C13N4O2	15.65	1.55	13	4	0
243	C14H33N3	16.8	1.33	14	33	3	244	C14H28O3	15.69	1.75	14	28	0
243	C14H17N3O	16.58	1.49	14	17	3	244	C14H12O4	15.48	1.92	14	12	0
243	C14HN3O2	16.37	1.66	14	1	3	244	C14H30NO2	16.07	1.61	14	30	1
243	C14H19N4	16.96	1.35	14	19	4	244	C14H14NO3	15.85	1.78	14	14	1
243	C14H3N4O	16.74	1.52	14	3	4	244	C14H32N2O	16.44	1.47	14	32	2
243	C15H31O2	16.78	1.72	15	31	0	244	C14H16N2O2	16.23	1.63	14	16	2
243	C15H15O3	16.57	1.89	15	15	0	244	C14N2O3	16.01	1.8	14	2	0
243	C15H33NO	17.16	1.58	15	33	1	244	C14H18N3O	16.6	1.49	14	18	3
243	C15H17NO2	16.94	1.75	15	17	1	244	C14H2N3O2	16.38	1.66	14	2	3
243	C15HNO3	16.72	1.91	15	1	1	244	C14H20N4	16.97	1.36	14	20	4
243	C15H19N2O	17.32	1.61	15	19	2	244	C14H4N4O	16.76	1.52	14	4	4
243	C15H3N2O2	17.1	1.77	15	3	2	244	C15H32O2	16.8	1.72	15	32	0
243	C15H21N3	17.69	1.47	15	21	3	244	C15H16O3	16.58	1.89	15	16	0
243	C15H5N3O	17.47	1.64	15	5	3	244	C15O4	16.37	2.05	15	0	0
243	C15H7N4	17.85	1.5	15	7	4	244	C15H18NO2	16.96	1.75	15	18	1
243	C16H19O2	17.67	1.87	16	19	0	244	C15H2NO3	16.74	1.91	15	2	1
243	C16H3O3	17.47	1.64	16	3	0	244	C15H20N2O	17.33	1.61	15	20	2
243	C16H21NO	18.05	1.73	16	21	1	244	C15H4N2O2	17.11	1.78	15	4	2
243	C16H5NO2	17.83	1.9	16	5	1	244	C15H22N3	17.71	1.48	15	22	3
243	C16H23N2	18.42	1.6	16	23	2	244	C15H6N3O	17.49	1.64	15	6	3
243	C16H7N2O	18.2	1.76	16	7	2	244	C15H8N4	17.86	1.5	15	8	4
243	C16H9N3	18.58	1.63	16	9	3	244	C16H20O2	17.69	1.87	16	20	0
243	C17H23O	18.78	1.86	17	23	0	244	C16H4O3	17.47	2.03	16	4	0
243	C17H7O2	18.56	2.02	17	7	0	244	C16H22NO	18.06	1.74	16	22	1
243	C17H25N	19.15	1.73	17	25	1	244	C16H6N2	17.85	1.9	16	6	2
243	C17H9NO	18.93	1.89	17	9	1	244	C16H24N2	18.44	1.6	16	24	2
243	C17H11N2	19.31	1.76	17	11	2	244	C16H8N2O	18.22	1.77	16	8	2
243	C18H27	19.88	1.87	18	27	0	244	C16H10N3	18.59	1.63	16	10	3
243	C18H11O	19.67	2.03	18	11	0	244	C17H24O	18.79	1.87	17	24	0
243	C18H13N	20.04	1.9	18	13	1	244	C17H8O2	18.58	2.03	17	8	0
243	C19H15	20.77	2.05	19	15	0	244	C17H26N	19.17	1.74	17	26	1
243	C19HN	20.93	2.08	19	1	1	244	C17H10NO	18.95	1.90	17	10	1
243	C20H3	21.66	2.23	20	3	0	244	C17H12N2	19.33	1.77	17	12	2
							244	C18H28	19.90	1.87	18	28	0
244	C11H20N2O4	13.13	1.6	11	20	2	244	C18H12O	19.68	2.03	18	12	0
244	C11H22N3O3	13.5	1.45	11	22	3	244	C18H14N	20.06	1.91	18	14	1
244	C11H24N4O2	13.87	1.3	11	24	4	244	C18N2	20.21	1.94	18	0	2
244	C12H22NO4	13.86	1.69	12	24	1	244	C19H16	20.79	2.05	19	16	0
244	C12H24N2O3	14.23	1.54	12	24	2	244	C19O	20.57	2.21	19	0	0
244	C12H8N2O4	14.01	1.71	12	8	2	244	C19H2N	20.94	2.08	19	2	1
244	C12H26N3O2	14.61	1.4	12	26	3	244	C20H4	21.68	2.23	20	4	0
244	C12H10N3O3	14.39	1.56	12	10	3							
244	C12H28N4O	14.98	1.25	12	28	4	245	C11H21N2O4	13.14	1.60	11	21	2
244	C12H12N4O2	14.76	1.42	12	12	4	245	C11H23N3O3	13.52	1.45	11	23	3
244	C13H24O4	14.59	1.79	13	24	0	245	C11H25N4O2	13.89	1.30	11	25	4
244	C13H26NO3	14.96	1.64	13	26	1	245	C12H23NO4	13.87	1.69	12	23	1
244	C13H10NO4	14.75	1.81	13	10	1	245	C12H25N2O3	14.25	1.54	12	25	2
244	C13H28N2O2	15.34	1.5	13	28	2	245	C12H9N2O4	14.03	1.71	12	9	2
244	C13H12N2O3	15.12	1.67	13	12	2	245	C12H27N3O2	14.62	1.4	12	27	3
244	C13H30N3O	15.71	1.36	13	30	3	245	C12H11N3O3	14.40	1.57	12	11	3
244	C13H14N3O2	15.49	1.52	13	14	3	245	C12H29N4O	15.0	1.25	12	29	4
244	C13H32N4	16.09	1.21	13	32	4	245	C12H13N4O2	14.78	1.42	12	13	4

245	C13H25O4	14.60	1.79	13	25	0	246	C12H10N2O4	14.05	1.72	12	10	2
245	C13H27NO3	14.98	1.65	13	27	1	246	C12H28N3O2	14.64	1.40	12	28	3
245	C13H11NO4	14.76	1.81	13	11	1	246	C12H12N3O3	14.42	1.57	12	12	3
245	C13H29N2O2	15.35	1.50	13	29	2	246	C12H30N4O	15.01	1.25	12	30	4
245	C13H13N2O3	15.14	1.67	13	13	2	246	C12H14N4O2	14.80	1.42	12	14	4
245	C13H31N3O	15.73	1.36	13	31	3	246	C13H26O4	14.62	1.79	13	26	0
245	C13H15N3O2	15.51	1.53	13	15	3	246	C13H28NO3	14.99	1.65	13	28	1
245	C13H17N4O	15.88	1.38	13	17	4	246	C13H12NO4	14.78	1.82	13	12	1
245	C13HN4O2	15.67	1.55	13	1	4	246	C13H30N2O2	15.37	1.50	13	30	2
245	C14H29O3	15.71	1.75	14	29	0	246	C13H14N2O3	15.15	1.67	13	14	2
245	C14H13O4	15.49	1.92	14	13	0	246	C13H16N3O2	15.53	1.53	13	16	3
245	C14H31NO2	16.08	1.61	14	31	1	246	C13N3O3	15.31	1.70	13	3	3
245	C14H15NO3	15.87	1.78	14	15	1	246	C13H18N4O	15.90	1.39	13	18	4
245	C14H17N2O2	16.24	1.64	14	17	2	246	C13H2N4O2	15.68	1.55	13	2	4
245	C14HN2O3	16.02	1.80	14	1	2	246	C14H30O3	15.73	1.75	14	30	0
245	C14H19N3O	16.62	1.50	14	19	3	246	C14H14O4	15.51	1.92	14	14	0
245	C14H3N3O2	16.40	1.66	14	3	3	246	C14H16NO3	15.88	1.78	14	16	1
245	C14H21N4	16.99	1.36	14	21	4	246	C14NO4	15.67	1.95	14	0	1
245	C14H5N4O	16.77	1.52	14	5	4	246	C14H18N2O2	16.26	1.64	14	18	2
245	C15H17O3	16.60	1.89	15	17	0	246	C14H2N2O3	16.04	1.80	14	2	2
245	C15HO4	16.38	2.06	15	1	0	246	C14H20N3O	16.63	1.50	14	20	3
245	C15H19NO2	16.97	1.75	15	19	1	246	C14H4N3O2	16.41	1.66	14	4	3
245	C15H3NO3	16.76	1.92	15	3	1	246	C14H22N4	17.01	1.36	14	22	4
245	C15H21N2O	17.35	1.62	15	21	2	246	C14H6N4O	16.79	1.53	14	6	4
245	C15H5N2O2	13.13	1.78	15	5	2	246	C15H18O3	16.61	1.89	15	18	0
245	C15H23N3	17.72	1.48	15	23	3	246	C15H2O4	16.40	2.06	15	2	0
245	C15H7N3O	17.50	1.64	15	7	3	246	C15H20NO2	16.99	1.76	15	20	1
245	C15H9N4	17.88	1.51	15	9	4	246	C15H4NO3	16.77	1.92	14	4	1
245	C16H21O2	17.70	1.87	16	21	0	246	C15H22N2O	17.36	1.62	15	22	2
245	C16H5O3	17.49	2.04	16	5	0	246	C15H6N2O2	17.15	1.78	15	6	2
245	C16H23NO	18.08	1.74	16	23	1	246	C15H24N3	17.74	1.48	15	24	3
245	C16H7NO2	17.86	1.90	16	7	1	246	C15H8N3O	17.52	1.65	15	8	3
245	C16H25N2	18.45	1.61	16	25	2	246	C15H10N4	17.89	1.51	15	10	4
245	C16H9N2O	18.24	1.77	16	9	2	246	C16H22O2	17.72	1.88	16	22	0
245	C16H11N3	18.61	1.64	16	11	3	246	C16H6O3	17.50	2.04	16	6	0
245	C17H25O	18.81	1.87	17	25	0	246	C16H24NO	18.09	1.74	16	24	1
245	C17H9O2	18.59	2.03	17	9	0	246	C16H8NO2	17.88	1.90	16	8	1
245	C17H27N	19.18	1.74	17	27	1	246	C16H26N2	18.47	1.61	16	26	2
245	C17H11NO	18.97	1.90	17	11	1	246	C16H10N2O	18.25	1.77	16	10	2
245	C17H13N2	19.34	1.77	17	13	2	246	C16H12N3	18.63	1.64	16	12	3
245	C18H29	19.91	1.88	18	29	0	246	C17H26O	18.83	1.87	17	26	0
245	C18H13O	19.70	2.04	18	13	0	246	C17H10O2	18.61	2.03	17	10	0
245	C18H15N	20.07	1.91	18	15	1	246	C17H28N	19.20	1.74	17	28	1
245	C18HN2	20.23	1.94	18	1	2	246	C17H12NO	18.98	1.90	17	12	1
245	C19H17	20.80	2.05	19	17	0	246	C17H14N2	19.36	1.77	17	14	2
245	C19HO	20.59	2.21	19	1	0	246	C17N3	19.51	1.80	17	0	3
245	C19H3N	20.96	2.09	19	3	1	246	C18H30	19.93	1.88	18	30	0
245	C20H5	21.69	2.24	20	5	0	246	C18H14O	19.71	2.04	18	14	0
							246	C18H16N	20.09	1.91	18	16	1
246	C11H22N2O4	13.16	1.60	11	22	2	246	C18NO	19.87	2.09	18	0	1
246	C11H24N3O3	13.53	1.45	11	24	3	246	C18H2N2	20.25	1.94	18	2	2
246	C11H26N4O2	13.91	1.30	11	26	4	246	C19H18	20.82	2.06	19	18	0
246	C12H24NO4	13.89	1.70	12	24	1	246	C19H2O	20.60	2.21	19	20	0
246	C12H26N2O3	14.26	1.55	12	26	2	246	C19H4N	20.98	2.09	19	4	1

246	C20H6	21.71	2.24	20	6	0	247	C18HNO	19.89	2.07	18	1	1
							247	C18H3N2	20.26	1.95	18	3	2
247	C11H23N2O4	13.17	1.60	11	23	2	247	C19H19	20.84	2.06	19	19	0
247	C11H25N3O3	13.55	1.45	11	25	3	247	C19H3O	20.62	2.22	19	3	0
247	C11H27N4O2	13.92	1.30	11	27	4	247	C19H5N	20.99	2.09	19	5	1
247	C12H25NO4	13.91	1.70	12	25	1	247	C20H7	21.72	2.24	20	7	0
247	C12H27N2O3	14.28	1.55	12	27	2							
247	C12H11N2O4	14.06	1.72	12	11	2	248	C11H24N2O4	13.19	1.61	11	24	2
247	C12H29N3O2	14.65	1.40	12	29	3	248	C11H26N3O3	13.56	1.45	11	26	3
247	C12H13N3O3	14.44	1.57	12	13	3	248	C11H28N4O2	13.94	1.31	11	28	4
247	C12H15N4O2	14.81	1.42	12	15	4	248	C12H26NO4	13.92	1.70	12	26	1
247	C13H27O4	14.64	1.80	13	27	0	248	C12H28N2O3	14.30	1.55	12	28	2
247	C13H29NO3	15.01	1.65	13	29	1	248	C12H12N2O4	14.08	1.72	12	12	2
247	C13H13NO4	14.79	1.82	13	13	1	248	C12H14N3O3	14.55	1.57	12	14	3
247	C13H15N4O2	15.17	1.67	13	15	4	248	C12H16N4O2	14.83	1.43	12	16	4
247	C13H15N2O3	15.17	1.67	13	15	2	248	C13H28O4	14.65	1.80	13	28	0
247	C13H17N3O2	15.54	1.53	13	17	3	248	C13H14NO4	14.81	1.82	13	14	1
247	C13HN3O3	15.33	1.70	13	1	3	248	C13H16N2O3	15.18	1.68	13	16	2
247	C13H19N4O	15.92	1.39	13	19	4	248	C13N2O4	14.97	1.84	13	0	2
247	C13H3N4O2	15.70	1.55	13	3	4	248	C13H18N3O2	15.56	1.53	13	18	3
247	C14H15O4	15.52	1.93	14	15	0	248	C13H2N3O3	15.34	1.70	13	2	3
247	C14H17NO3	15.90	1.78	14	17	1	248	C13H20N4O	15.93	1.39	13	20	4
247	C14HNO4	15.68	1.95	14	1	1	248	C13H4N4O2	15.72	1.56	13	4	4
247	C14H19N2O2	16.27	1.64	14	19	2	248	C14H16O4	15.54	1.93	14	16	0
247	C14H3N2O2	16.06	1.81	14	3	2	248	C14H18NO3	15.92	1.79	14	18	1
247	C14H21N3O	16.65	1.50	14	21	3	248	C14H2NO4	15.70	1.95	14	2	1
247	C14H5N3O2	16.43	1.67	14	5	3	248	C14H20N2O2	16.29	1.64	14	20	2
247	C14H23N4	17.02	1.36	14	23	4	248	C14H4N2O3	16.07	1.81	14	4	2
247	C14H7N4O	16.81	1.53	14	7	4	248	C14H22N3O	16.66	1.50	14	22	3
247	C15H19O3	16.63	1.90	15	19	0	248	C14H6N3O2	16.45	1.67	14	6	3
247	C15H3O4	16.41	2.06	15	3	0	248	C14H24N4	17.07	1.37	14	24	4
247	C15H21NO2	17.00	1.76	15	21	1	248	C14H8N4O	16.82	1.53	14	8	4
247	C15H5NO3	16.79	1.92	15	5	1	248	C15H20O3	16.65	1.90	15	20	0
247	C15H23N2O	17.38	1.62	15	23	2	248	C15H4O4	16.43	2.06	15	4	0
247	C15H7N2O2	17.16	1.78	15	7	2	248	C15H22NO2	17.02	1.76	15	22	1
247	C15H25N3	17.75	1.49	15	25	3	248	C15H6NO3	16.80	1.92	15	6	1
247	C15H9N3O	17.54	1.65	15	9	3	248	C15H24N2O	17.40	1.62	15	24	2
247	C15H11N4	17.91	1.51	15	11	4	248	C15H8N2O2	17.18	1.79	15	8	2
247	C16H23O2	17.74	1.88	16	23	2	248	C15H26N3	17.77	1.49	15	26	3
247	C16H7O3	17.52	2.04	16	7	0	248	C15H10N3O	17.55	1.65	15	10	3
247	C16H25NO	18.11	1.75	16	25	1	248	C15H12N4	17.93	1.52	15	12	4
247	C16H9NO2	17.89	1.91	16	9	1	248	C15H24O2	17.75	1.88	15	24	0
247	C16H27N2	18.48	1.61	16	27	2	248	C16H8O3	17.53	2.05	16	8	0
247	C16H11N2O	18.27	1.77	16	11	2	248	C16H26NO	18.13	1.75	16	26	1
247	C16H13N3	18.64	1.64	16	13	3	248	C16H10NO2	17.91	1.91	16	10	1
247	C17H27O	18.84	1.88	17	27	0	248	C16H28N2	18.50	1.62	16	28	2
247	C17H11O2	18.62	2.04	17	11	0	248	C16H12N2O	18.28	1.78	16	12	2
247	C17H29N	19.22	1.75	17	29	1	248	C16H14N3	18.66	1.64	16	14	3
247	C17H13NO	19.00	1.91	17	13	1	248	C16N4	18.82	1.67	16	0	4
247	C17H15N2	19.37	1.78	17	15	2	248	C17H28O	18.86	1.88	17	28	0
247	C17HN3	19.53	1.81	17	1	3	248	C17H12O2	18.64	2.04	17	12	0
247	C17H31	19.90	1.88	17	31	0	248	C17H30N	19.23	1.75	17	30	1
247	C18H15O	19.73	2.04	18	15	0	248	C17H14NO	19.01	1.91	17	14	1
247	C18H17N	20.10	1.92	18	17	1	248	C17H16N2	19.39	1.78	17	16	2

248	C17N2O	19.17	1.94	17	0	2	249	C17H31N	19.25	1.75	17	31	1
248	C17H2N3	19.55	1.81	17	2	3	249	C17H15NO	19.03	1.91	17	15	1
248	C18H32	19.96	1.89	18	32	0	249	C17H17N2	19.41	1.78	17	17	2
248	C18H16O	19.75	2.04	18	16	0	249	C17HN2O	19.19	1.94	17	1	2
248	C18O2	19.53	2.20	18	0	0	249	C17H3N3	19.56	1.81	17	3	3
248	C18H18N	20.12	1.92	18	18	1	249	C18H33	19.98	1.89	18	33	0
248	C18H2NO	19.90	2.08	18	2	1	249	C18H17O	19.76	2.05	18	17	0
248	C18H4N2	20.28	1.95	18	4	2	249	C18HO2	19.54	2.21	18	1	0
248	C19H20	20.85	2.06	19	20	0	249	C18H19N	20.14	1.92	18	19	1
248	C19H4O	20.63	2.22	19	4	0	249	C18H3NO	19.92	2.08	18	3	1
248	C19H6N	21.01	2.10	19	6	1	249	C18H5N2	20.29	1.95	18	5	2
248	C20H8	21.74	2.25	20	8	0	249	C19H21	20.87	2.07	19	21	0
							249	C19H5O	20.65	2.22	19	5	0
249	C11H25N2O4	13.21	1.61	11	25	2	249	C19H7N	21.02	2.10	19	7	1
249	C11H27N3O3	13.58	1.46	11	27	3	249	C20H9	21.76	2.25	20	9	0
249	C12H27NO4	13.94	1.70	12	27	1							
249	C12H13N2O4	14.09	1.72	12	13	2	250	C11H26N2O4	13.22	1.61	11	26	2
249	C12H15N3O3	14.47	1.58	12	15	3	250	C12H14N2O4	14.11	1.73	12	14	2
249	C12H17N4O2	14.84	1.43	12	17	4	250	C12H16N3O3	14.48	1.58	12	16	3
249	C13H15NO4	14.83	1.82	13	15	1	250	C12H18N4O2	14.86	1.43	12	18	4
249	C13H17N2O3	15.20	1.68	13	17	2	250	C12H16NO4	14.84	1.83	12	16	1
249	C13HN2O4	14.98	1.85	13	1	2	250	C13H18N2O3	15.22	1.68	13	18	2
249	C13H19N3O2	15.57	1.54	13	19	3	250	C13H2N2O4	15.00	1.85	13	2	2
249	C13H3N3O3	15.36	1.70	13	3	3	250	C13H20N3O2	15.59	1.54	13	20	3
249	C13H21N4O	15.95	1.39	13	21	4	250	C13H4N3O3	15.37	1.71	13	4	3
249	C13H5N4O2	15.73	1.56	13	5	4	250	C13H22N4O	15.96	1.40	13	22	4
249	C14H17O4	15.56	1.93	14	17	0	250	C13H6N4O2	15.75	1.56	13	6	4
249	C14H19NO3	15.93	1.79	14	19	1	250	C13H18O4	15.57	1.93	13	18	0
249	C14H3NO4	15.71	1.95	14	3	1	250	C14H20NO3	15.95	1.79	14	20	1
249	C14H21N2O2	16.31	1.65	14	21	2	250	C14H4NO4	15.73	1.96	14	4	1
249	C14H5N2O2	16.09	1.81	14	5	2	250	C14H22N2O2	16.32	1.65	14	22	2
249	C14H23N3O	16.68	1.51	14	23	2	250	C14H6N2O3	16.10	1.82	14	6	2
249	C14H7N3O2	16.46	1.76	14	7	3	250	C14H24N3O	16.70	1.51	14	24	3
249	C14H25N4	17.05	1.37	14	25	4	250	C14H8N3O2	16.48	1.67	14	8	3
249	C14H9N4O	16.84	1.53	14	9	4	250	C14H26N4	17.07	1.37	14	26	4
249	C15H21O3	16.66	1.90	15	21	0	250	C14H10N4O	16.85	1.54	14	10	4
249	C15H5O4	16.45	2.07	15	5	0	250	C14H22O3	16.68	1.90	14	22	0
249	C15H23NO2	17.04	1.76	15	23	1	250	C15H6O4	16.46	2.07	14	6	0
249	C15H7NO3	16.82	1.93	15	7	1	250	C15H24NO2	17.05	1.77	15	24	1
249	C15H25N2O	17.41	1.63	15	25	2	250	C15H8NO3	16.84	1.93	15	8	1
249	C15H9N2O2	17.19	1.79	15	9	2	250	C15H26N2O	17.43	1.63	15	26	2
249	C15H27N3	17.79	1.49	15	27	3	250	C15H10N2O2	17.21	1.79	15	10	2
249	C15H11N3O	17.57	1.65	15	11	3	250	C15H28N3	17.80	1.49	15	28	3
249	C15H13N4	17.94	1.52	15	13	4	250	C15H12N3O	17.58	1.66	15	12	3
249	C16H25O2	17.77	1.89	16	25	0	250	C15H14N4	17.96	1.52	15	14	4
249	C16H9O3	17.55	2.05	16	9	0	250	C16H26O2	17.78	1.89	16	26	0
249	C16H27NO	18.14	1.75	16	27	1	250	C16H10O3	17.57	2.05	16	10	0
249	C16H11NO2	17.93	1.91	16	11	1	250	C16H28NO	18.16	1.75	16	28	1
249	C16H29N2	18.52	1.62	16	29	2	250	C16H12NO2	17.94	1.72	16	12	1
249	C16H13N2O	18.30	1.78	16	13	2	250	C16H30N2	18.53	1.62	16	30	2
249	C16H15N3	18.67	1.65	16	15	3	250	C16H14N2O	18.32	1.78	16	14	2
249	C16HN4	18.83	1.68	16	1	4	250	C16H16N3	18.69	1.65	16	16	0
249	C17H29O	18.87	1.88	16	29	0	250	C16N3O	18.47	1.81	16	0	3
249	C17H13O2	18.66	2.04	17	13	0	250	C16H2N4	18.85	1.68	16	2	4

---

250	C17H30O	18.89	1.89	17	30	0
250	C17H14O2	18.67	2.04	17	14	0
250	C17H32N	19.26	1.76	17	32	1
250	C17H16NO	19.05	1.91	17	16	1
250	C17NO2	18.83	2.07	17	0	1
250	C17H18N2	19.42	1.79	17	18	2
250	C17H2N2O	19.20	1.94	17	2	2
250	C17H4N3	19.58	1.82	17	4	3
250	C18H34	19.99	1.89	18	34	0
250	C18H18O	19.78	2.05	18	18	0
250	C18H2O2	19.56	2.21	18	2	0
250	C18H20N	20.15	1.92	18	20	1
250	C18H4NO	19.94	2.08	18	4	1
250	C18H6N2	20.31	1.96	18	6	2
250	C19H22	20.88	2.07	19	22	0
250	C19H6O	20.67	2.23	19	6	0
250	C19H8N	21.04	2.10	19	8	1
250	C20H10	21.77	2.25	20	10	0

- **La base de données réalisée dans le programme pour déterminer les structures imputées des principaux fragments**

Dans cette base de données deux colonnes réalisées, la première colonne contient le rapport m/z et le deuxième les structures imputées des fragments perdus de rapport 14 à 154 avec plus de 150 structures imputées.

**Tableau 33** : La base de données réalisée pour déterminer la structure imputée des principaux fragments

<u>Le rapport m/z</u>	<u>structure imputée des fragments perdus</u>
14	CH2
15	CH3
16	O
17	OH
18	H2O
18	NH4
19	H3O
26	C2H2
26	CN
27	C2H3
28	C2H4
28	CO
28	N2
28	CH=NH
29	C2H5
29	CHO
30	CH2NH2(RCH2NH2)
30	NO
31	CH2OH(RCH2OH)
31	OCH3
32	O2(air)
39	C3H3
40	CH2C=N
41	C3H5
41	C2H2NH
41	CH2C=N+H
42	C3H6
42	C2H2O
43	C3H7
43	CH3C=O
44	CH2CH=O(aldehyde_rearangement_de_McLafferty)
44	CH3CHNH2
44	CO2
44	NH2C=O



44	$\text{N}(\text{CH}_3)_2$
45	$\text{CH}_3\text{CHOH}$
45	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$
45	$\text{CH}_2\text{OCH}_3$
45	$\text{OHC}=\text{O}$
45	$\text{CH}_3\text{CH}-\text{O}+\text{H}$
46	$\text{NO}_2$
51	$\text{C}_4\text{H}_3$
53	$\text{C}_4\text{H}_5$
54	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$
55	$\text{C}_4\text{H}_7$
55	$\text{CH}_2=\text{CHC}=\text{O}$
56	$\text{C}_4\text{H}_8$
57	$\text{C}_4\text{H}_9$
57	$\text{C}_2\text{H}_5\text{C}=\text{O}$
58	$\text{CH}_3(\text{C}=\text{O})\text{CH}_2+\text{H}$
58	$\text{C}_2\text{H}_5\text{CHNH}_2$
58	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCH}_2$
58	$(\text{CH}_3)_2\text{NCH}_2$
59	$(\text{CH}_3)_2\text{COH}$
59	$\text{CH}_2\text{OC}_2\text{H}_5$
59	$\text{O}=\text{C}-\text{OCH}_3(\text{RCO}_2\text{CH}_3)$
59	$\text{NH}_2\text{C}(\text{CH}_2)=\text{O}$
59	$\text{CH}_3\text{OCHCH}_3$
59	$\text{CH}_3\text{CHCH}_2\text{OH}$
59	$\text{C}_2\text{H}_5\text{CHOH}$
60	$\text{CH}_2\text{COOH}+\text{H}$
60	$\text{CH}_2\text{ONO}$
61	$\text{CH}_3\text{COO}+2\text{H}$
65	$\text{C}_5\text{H}_5$
66	$\text{C}_5\text{H}_6$
67	$\text{C}_5\text{H}_7$
68	$\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CN}$
69	$\text{C}_5\text{H}_9$
69	$\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHC}=\text{O}$
69	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)\text{C}=\text{O}$
70	$\text{C}_5\text{H}_{10}$
71	$\text{C}_5\text{H}_{11}$
71	$\text{C}_3\text{H}_7\text{C}=\text{O}$
72	$\text{C}_2\text{H}_5\text{C}(\text{CH}_2)=\text{O}+\text{H}$
72	$(\text{CH}_3)_2\text{N}=\text{C}=\text{O}$
72	$\text{C}_2\text{H}_5\text{NHCHCH}_3$
74	$\text{CH}_2\text{COOCH}_3+\text{H}$
75	$\text{C}_2\text{H}_5\text{COO}+2\text{H}$
75	$\text{OOC}_2\text{H}_5+2\text{H}$
75	$(\text{CH}_3\text{O})_2\text{CH}$
76	$\text{C}_6\text{H}_4(\text{C}_6\text{H}_5\text{X}-\text{C}_6\text{H}_4\text{XY})$
77	$\text{C}_6\text{H}_5(\text{C}_6\text{H}_5\text{X}-\text{C}_6\text{H}_4\text{XY})$
78	$\text{C}_6\text{H}_5+\text{H}$
79	$\text{C}_6\text{H}_5+2\text{H}$

82	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN
82	C <sub>6</sub> H <sub>10</sub>
83	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub>
85	C <sub>6</sub> H <sub>13</sub>
85	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> C=O
86	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> C(CH <sub>2</sub> )=O
86	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> CHNH <sub>2</sub>
87	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> COO
88	CH <sub>2</sub> (C=O)OC <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +H
89	O=COC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> +2H
89	ph-C
90	CH <sub>3</sub> CHONO <sub>2</sub>
90	ph-CH
91	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> (Ar-CH <sub>2</sub> -tropilyom)
93	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub>
93	ph-O
93	C <sub>7</sub> H <sub>9</sub> (terpenes)
95	(furan)-C=O
96	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CN
98	(furanre)-CH <sub>2</sub> O+H
97	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub>
99	C <sub>7</sub> H <sub>15</sub>
100	C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> C(CH <sub>2</sub> )=O
101	OCOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub>
102	CH <sub>2</sub> COOC <sub>3</sub> H <sub>7</sub> +H
103	OCOC <sub>4</sub> H <sub>9</sub> +2H
104	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHONO <sub>2</sub>
105	ph-C=O
	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C(=O)OH_C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C(=O)OR_C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> C(=O)Oph_C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> _C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CHCH
106	ph-NHCH <sub>2</sub>
107	ph-CH <sub>2</sub> O
107	CH <sub>2</sub> -ph-OH (meta-ou-para)
108	ph-CH <sub>2</sub> O+H
119	ph-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
119	CH <sub>3</sub> -ph-C=O
121	OH-ph-C=O
122	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COO+H
123	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COO+2H
138	OH-ph-COO+H
154	ph-ph

- **La base de données réalisée pour déterminer les groupes fonctionnels**

Dans cette base de données on pose sept colonne, les quatre premières colonnes utilisées pour les quatre états de pic, pic à faible intensité et nommé F, pic à intensité moyenne et nommé M, pic à forte intensité nommé S et pic large nommé B.

La cinquième et sixième colonne est réservée pour la valeur maximale et la valeur minimale d'absorption de chaque groupe fonctionnel à la zone de vibration d'élongation, dans la septième colonne on pose le groupe fonctionnel correspondant à chaque intervalle d'absorption.

**Tableau 34** : La base de données réalisée dans le programme pour calculer les groupes fonctionnels du composé analysé.

<u>Etat du pic</u>			<u>Intervalle d'absorption</u>		<u>Le groupe fonctionnel correspondant</u>	
M	S	0	0	2850	2950	C-H-ALKANE-OU-CYCLOALCANES
M	0	0	0	3010	3100	C-H-ALCENE
M	0	0	0	1620	1680	C=C-ALCENE
0	S	0	0	3500	3700	O-H-LIBRE-ALCOOL-OU-PHENOLS-OU-ACIDES
0	0	0	B	3300	3500	O-H-ASSOCIEE-ALCOOL-OU-PHENOLS
0	0	0	B	3350	3550	N-H-LIBRE-DANS-LES-AMINES-PRIMERE-SI-EXISTE-DEUX-BANDES
0	0	F	0	3100	3500	N-H-ASSOCIEE-AMINE-SECONDAIRE-OU-AMIDE
0	0	F	0	3270	3300	C-H-ALCYNES-MONOSUBSTITUEES
0	0	0	B	3150	3350	CHLORHYDRATES-AMINE
0	0	0	B	2500	3300	O-H-ASSOCIEE-ACIDES-CARBOXYLIQUES
M	0	0	0	3000	3100	C-H-AROMATES-OU-ALCENES
M	0	0	0	2872	2962	C-H-METHYLE
M	0	0	0	2853	2926	C-H-METHYLENES
M	0	0	0	2190	2260	C≡C-ALCYNES-UN-OU-DEUX-SUBSTITUANTS
M	0	0	0	2220	2246	NITRILES
M	0	0	0	2210	2140	ALCYNES-MONOSUBSTITUANTS
M	0	0	0	1450	1600	C=C-CYCLE-AROMATIQUES
0	0	0	0	1630	1690	C=O-AMIDES-PRIMAIRE
0	S	0	0	1700	1725	C=O-ACIDES-CARBOXYLIQUES
0	S	0	0	1690	1750	C=O-CARBONYLES
0	S	0	0	1730	1750	C=O-ESTERE-DES-ALKYLES-SATURES
0	S	0	0	1680	1715	C=O-ALDEYDE-INSATURE-ET-AROMATIQUE
0	S	0	0	1620	1690	C=N
0	S	0	0	1555	1575	N=N
0	S	0	0	1620	1690	C=N-OXIME-AMINE
0	S	0	0	1580	1685	C=N-AMIDINE
0	S	0	0	2130	2300	DIAZONIUM-SALTS

0	0	0	0	2250	2285	O=C=N-
0	S	0	0	2130	2155	-N=C=N-DIAZO
0	S	0	0	1030	1085	C-O-DANS-LES-ALCOOLS-PRIMAIRE-SATUREE
0	S	0	0	1085	1125	C-O-DANS-LES-ALCOOLS-SECONDAIRE-SATUREE
0	S	0	0	1150	1125	C-O-DANS-LES-ALCOOLS-TETIARE-SATUREE
0	0	F	0	1440	1465	C-H-VIBRATION-DEFORMATION-ASSYMETREIQUE
0	0	F	0	1370	1390	C-H-VIBRATION-DEFORMATION-SYMETREIQUE
0	S	0	0	1260	1440	O-H-VIBRATION-DEFORMATION
0	S	0	0	1200	1300	O-H-PHENOLS
0	S	0	0	1110	1140	C-O-ETHER-VIBRATION-ELONGATION
M	S	0	0	1580	1650	N-H-VIBRATION-DEFORMATION-AMINE-PRIMAIRE
0	0	F	0	1490	1580	N-H-VIBRATION-DEFORMATION-AMINE-SECONDAIRE
0	0	F	0	1020	1090	C-N-VIBRATION-ELONGATION-AMINE-PRIMAIRE
M	0	0	0	1170	1190	C-N-VIBRATION-ELONGATION-AMINE-SECONDAIRE
M	0	0	0	2810	2830	C-H-ALDEYDE-VIBRATION-ELONGATION
M	0	0	0	2650	2745	C-H-ALDEYDE-VIBRATION-ELONGATION
0	S	0	0	1800	1840	C=O-ANYDRIDE-ACIDE-VERIFIEE-UN-AUTRE-BONDE-VERS-1740-1780
0	S	0	0	1740	1780	C=O-ANYDRIDE-ACIDE
0	S	0	0	1545	1555	NITRO-ALIPHATIQUE-PRIMAIRE-ET-SECONDAIRE
0	S	0	0	1360	1385	NITRO-ALIPHATIQUE-PRIMAIRE-ET-SECONDAIRE
0	S	0	0	1650	1680	NITRITES-O-N=O
0	S	0	0	1610	1625	NITRITES-O-N=O
0	S	0	0	855	870	NITRATES-N-O
M	0	0	0	860	900	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-MONOSUBSTITUE
0	S	0	0	730	770	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-MONOSUBSTITUE
0	S	0	0	690	710	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-MONOSUBSTITUE
0	S	0	0	735	770	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-BISUBSTITUE-ORTHO
0	S	0	0	680	710	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-BISUBSTITUE-META
M	S	0	0	830	880	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-BISUBSTITUE-META
0	S	0	0	790	840	=C-H-VIBRATION-DEFORMATION-BENZENE-BISUBSTITUE-PARA

- **La base de données réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes supportés le proton**

Dans cette base de données on pose deux colonnes, la première contient les groupes liés aux atomes supportés le proton responsable sur la résonance et la deuxième colonne contient les valeurs des déplacements chimiques de chaque groupe.

**Tableau 35 :** La base de données utilisée dans le programme pour déterminer le proton d'un groupe responsable de résonance

<u>Le proton</u>	<u>le déplacement chimique (ppm)</u>
CH <sub>3</sub> -C	0.9
CH <sub>3</sub> -C-C=	1.1
CH <sub>3</sub> -C-O	1.4
CH <sub>3</sub> -C=C	1.6
CH <sub>3</sub> -Ar	2.3
CH <sub>3</sub> -CO-R	2.2
CH <sub>3</sub> -CO-Ar	2.6
CH <sub>3</sub> -CO-OR	2.0
CH <sub>3</sub> -CO-OAr	2.4
CH <sub>3</sub> -CO-NR	2.0
CH <sub>3</sub> -OR	3.3
CH <sub>3</sub> -OH	3.4
CH <sub>3</sub> -O-Ar	3.8
CH <sub>3</sub> -O-CO-R	3.7
CH <sub>3</sub> -N-	2.3
CH <sub>3</sub> -N	3.3
CH <sub>3</sub> -C-NO <sub>2</sub>	1.6
CH <sub>3</sub> -C=C-CO	2.0
C=C(CH <sub>3</sub> )-CO	1.8
C=C	3.0
-C-CH <sub>2</sub> -C	1.3
CH <sub>2</sub> -CYCLIQUE	1.5
-C-CH <sub>2</sub> -C-C=C	1.7
-C-CH <sub>2</sub> -C-O	1.9
-C-CH <sub>2</sub> -C=C	2.3
-C-CH <sub>2</sub> -Ar	2.7
-C-CH <sub>2</sub> -CO-R	2.4
-C-CH <sub>2</sub> -CO-OR	2.3
-C-CH <sub>2</sub> -OR	3.4
-C-CH <sub>2</sub> -OH	3.6
-C-CH <sub>2</sub> -O-Ar	4.3
-C-CH <sub>2</sub> -O-CO-R	4.1
-C-CH <sub>2</sub> -N-	2.5
-C-CH <sub>2</sub> -NO <sub>2</sub>	4.4
-C-CH <sub>2</sub> -C-NO <sub>2</sub>	2.1
-C-CH <sub>2</sub> -C=C-CO	2.4

-CYCLOPROPANE	0.3
-C-CH-C	1.5
EN_TETE_DE_PONT	2.2
-C-CH-C-O	2.0
-C-CH-Ar	3.0
-C-CH-CO-R	2.7
-C-CH-OR	3.7
-C-CH-OH	3.9
-C-CH-O-CO-R	4.8
-C-CH-N-	2.8
-C-CH-NO <sub>2</sub>	4.7
PROTON-BENZENIQUE	7.2
-C=CH <sub>2</sub>	5.3
-C-CH-	5.1
-C-CH-(CYCLIQUE)	5.3
R-C	3.1
C-H	3.1
Ar-H	7.0
Ar-H	9.0
-C=CH-CO	5.9
-CH=C-CO	6.8
R-CHO	9.9
Ar-CHO	9.9
H-CO-O	8.0
H-CO-N	8.0
-CO-OH	8.5
-CO-OH	9.0
-CO-OH	10
-CO-OH	11
-CO-OH	12
-CO-OH	13
C=C-OH	11
C=C-OH	12
C=C-OH	13
C=C-OH	14
C=C-OH	15
C=C-OH	16
C=C-OH	17
R-OH	5.5
R-OH	6
R-OH	7
Ar-OH	5
Ar-OH	6
Ar-OH	7
Ar-OH (INTRAMOLECULAIRE)	1

- **La base de données réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes de carbone**

Dans ce cas on pose trois colonnes, les deux premières colonnes sont réservées pour la valeur minimale et maximale de déplacement chimique. Dans la troisième colonne on pose les groupes de l'atome de carbone correspond. Elle contient environ 35 cas où l'atome de carbone lié avec un autre carbone (de liaison simple, double ou multiple) ou avec un autre atome tel que nitrogène, oxygène...

**Tableau 36** : la base réalisée pour déterminer les groupes liés aux atomes de carbone

Intervalle de déplacement    l'atome de carbone correspond

10	35	CH <sub>3</sub> (un-substituant)
17	57	CH <sub>2</sub> (deux-substituants)
22	59	CH(trois-substituant)
30	40	C(quatres-substituants)
21	30	HYDROCARBURE-ALICYCLIQUES
55	85	C-O-C(ether)
35	52	R-OH(alcool)
100	167	HETEROAROMATIQUES
95	158	Ar-Y(Y-substituants-polaires)
120	150	Ar-R(R=H-ou-substituant-alkyle)
20	30	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> =>C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> (hydrocarbure-alicyclique-H <sub>2</sub> C=vers-100-120-et=C-R-vers-110-150)
110	150	H <sub>2</sub> C=CR
70	95	C=C-C=C-R(verifie-autre-deplacement-vers-200-215)
65	90	ALLENES
90	115	O-C-O(acetal-et-cetal)
-40	20	C-NR <sub>2</sub> (amine)
-40	40	C-NO <sub>2</sub> (nitro)
35	55	RCHO(aldehyde)
37	55	R-C=C-CH=O(aldehyde-alpha-beta insaturee)
195	220	R <sub>2</sub> C=O(cetone-saturee)
155	170	R-C=C-COOR'(ether-alpha-beta-insaturee)
160	175	R-COOR'(ester-saturee)
160	175	R-C=C-COOH(acide-carboxylique-alpha-beta-insaturee)
165	185	RCOOH(acide-carboxylique-saturee)
180	210	R-C=C-C=O(cetone-alpha-beta-insaturee)
150	170	(RCO <sub>2</sub> )O (anhydrides)
157	175	RCONH <sub>2</sub> (amides)
110	125	nitriles
145	165	R <sub>2</sub> C=NOH(oxyimes)
150	160	R <sub>2</sub> NCOOR'(carbamate)
110	135	R-N=C=O(isocyanates)
105	120	R-O-CN



# *Chapitre II*

*Interprétation et  
discussion des résultats*

## II.1 Introduction

Dans ce chapitre on traite quelques problèmes spectraux des composés organiques par notre programme et on interprète les résultats pour proposer une formule développée, en suite on compare ces résultats avec les formules développées des ces composés.

## II.2 Interprétation et comparaison des résultats du programme

### ◆ Exemple N<sup>0</sup> 1 :

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 150. Le pic M+1 présente une intensité relative de 9.9 % et le pic M+2 d'intensité 0.9 %.

Le programme donné au début une liste de 33 composés de masse molaire est égale à 150. Les composés sont :

C4H10N2O4  
C4H12N3O3  
C4H14N4O2  
C5H12NO4  
C5H14N2O3  
C5N3O3  
C5H2N4O2  
C6H14O4  
C6NO4  
C6H2N2O3  
C6H4N3O2  
C6H6N4O  
C7H2O4  
C7H4NO3  
C7H6N2O2  
C7H8N3O  
C7H10N4  
C8H6O3  
C8H8NO2  
C8H10N2O  
C8H12N3  
C9H10O2  
C9H12NO  
C9H14N2  
C9N3  
C10H14O  
C10H16N  
C10NO  
C10H2N2  
C11H18  
C11H2O  
C11H4N  
C12H6

Si on donne l'intensité M+1 % et M+2 %, on obtient le composé suivant :



Donc ; la formule brute du composé est  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$ .

Le spectre ultraviolet visible de ce composé donné 5 valeurs des longueurs d'ondes et ainsi le programme donné la valeur de DBE=5 de ce composé.

Pour le spectre de masse en recherche sur les principaux fragments perdus, le rapport m/z des principaux fragments sont : 43, 51, 63, 77, 91 et 108 comme pic de base, on trouve les fragments perdus suivantes :

Pour 43 on trouve  $\text{C}_3\text{H}_7$  et  $\text{CH}_3\text{C}=\text{O}$ , 51 :  $\text{C}_4\text{H}_3$ , 63 :  $\text{C}_6\text{H}_5$ , 91 :  $\text{C}_7\text{H}_7$  et 108 :  $\text{Ar}-\text{CH}_2\text{O}+\text{H}$ .

Pour le spectre infrarouge en recherche sur les principaux groupes fonctionnels, les principaux bandes observés sont :  $1225\text{ cm}^{-1}$ ,  $1750\text{ cm}^{-1}$ ,  $1500\text{ cm}^{-1}$ ,  $1580\text{ cm}^{-1}$ ,  $1600\text{ cm}^{-1}$ ,  $2950\text{ cm}^{-1}$ ,  $2975\text{ cm}^{-1}$ ,  $3030\text{ cm}^{-1}$ ,  $880$  et  $750\text{ cm}^{-1}$ , a partir ces données on trouve : groupe C-O, C=O des esters saturés ou des carbonyles, C=C des cycles aromatiques, C-H dans les alcanes, C-H de groupe méthyle et C-H dans les cycles aromatiques ou les alcènes, C-H vibration de déformation dans cycle benzénique monosubstituée.

Le spectre RMN de proton donne trois pics fins de valeurs : 7.22 ppm, 5.00 ppm et 1.96 ppm, à partir de ces données on trouve : proton du benzène et le proton du groupe  $\text{CH}_3\text{COOR}$ .

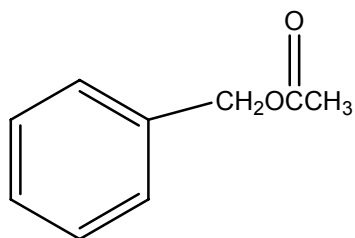
On regroupe tous ces résultats pour donner une formule développée de ce composé :  
Le spectre de masse de masse donné une formule brute  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$  ainsi les formules des principaux fragment perdus.

Le spectre ultraviolet visible donne une valeur de DBE=5, cette valeur est identique à la valeur observée dans le spectre ultraviolet de ce composé.

Le spectre infrarouge donne les groupes fonctionnels existents, on élimine seulement le groupe N-H, car la formule brute ne contient pas le nitrogène.

Le spectre RMN de proton donne une idée sur l'existence de cycle benzénique et groupe méthyle.

L'existence de cycle benzénique monosubstituée est claire à cause des fragments caractéristiques de benzène, le déplacement de proton de celle-ci, le nombre de DBE et les groupes C=C, =C-H aromatique. A partir du  $\text{C}_7\text{H}_7$  on peut tirer résultat que le cycle aromatique est lié avec  $\text{CH}_2$ . Le fragment  $\text{Ar}-\text{CH}_2\text{O}+\text{H}$  (m/z=108) confirme l'existence d'ester et que le reste de la formule est  $\text{CH}_3\text{C}=\text{O}$ , donc d'après tous ces résultats, la formule développée de ce composé est :



Acétate de benzyle

Par comparaison, cette formule développée trouvée est identique avec la formule développée du composé qui donne ces caractéristiques spectrales.

♦ **Exemple N° 2 :**

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 148. Le pic M+1 présente une intensité relative de 12.2 % et le pic M+2 d'intensité 0.8 %.

Le programme donne au début une liste de 34 composés de masse molaire est égale à 148. Les composés sont :

C4H8N2O4  
C4H10N3O3  
C4H12N4O2  
C5H10NO4  
C5H12N2O3  
C5H14N3O2  
C5H16N4O  
C5N4O2  
C6H12O4  
C6H14NO3  
C6H16N2O2  
C6N2O3  
C6H2N3O2  
C6H4N4O  
C7H16O3  
C7O4  
C7H2NO3  
C7H4N2O2  
C7H6N3O  
C7H8N4  
C8H4O3  
C8H6NO2  
C8H8N2O  
C8H10N3  
C9H8O2  
C9H10NO  
C9H12N2

C<sub>10</sub>H<sub>12</sub>O  
 C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N  
 C<sub>10</sub>N<sub>2</sub>  
 C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>  
 C<sub>11</sub>O  
 C<sub>11</sub>H<sub>2</sub>N  
 C<sub>12</sub>H<sub>4</sub>

Si on donne l'intensité M+1 % et M+2 %, on obtient le composé suivant :

C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>. Donc ; la formule brute du composé est C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>.

Pour le spectre ultraviolet visible, on obtient la valeur de DBE=4 de ce composé.

Pour le spectre de masse on recherche sur les structure des principaux fragments perdus de ce composé, les rapports m/z des principaux fragments les plus important sont : 29, 51, 63, 77, 78, 91, 105 et 119 comme pic de base, on trouve les fragments perdus suivantes. Pour 29 : C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> et CHO, 51 : C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>, 65 : C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>, 77 : C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, 91 : C<sub>7</sub>H<sub>7</sub> ou Ar-C=O, 108 : Ar-C(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> ou CH<sub>3</sub>-Ar-C=O. on élimine les fragments qui contient l'oxygène. (N'existe pas l'oxygène dans la formule brute)

Pour le spectre infrarouge en recherche sur les principaux groupes fonctionnels observés dans ce composé, les bandes caractéristiques observés sont : 1350 cm<sup>-1</sup>, 1495 cm<sup>-1</sup>, 1600 cm<sup>-1</sup>, 1540 cm<sup>-1</sup>, 2925 cm<sup>-1</sup>, 2985 cm<sup>-1</sup>, 3025 cm<sup>-1</sup>, 770 et 890 cm<sup>-1</sup>, a partir ces données on trouve : C-C dans les alcanes, C=C des cycles aromatiques monosubstituée, N-H dans les amines primaires, C-H dans les alcanes, C-H de groupe méthyle et C-H dans les cycles aromatiques ou les alcènes.

On utilise toutes ces informations pour donner une formule développée de ce composé :

Le spectre de masse de masse donné une formule brute C<sub>11</sub>H<sub>16</sub> ainsi les formules des principaux fragment perdus.

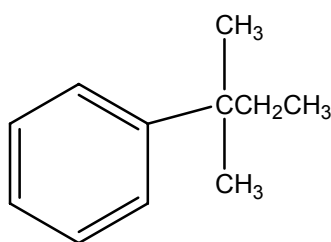
Le spectre ultraviolet visible donné une valeur de DBE=4, cette valeur est identique de la valeur observée dans le spectre ultraviolet de ce composé.

Le spectre infrarouge donné les groupes fonctionnels existent, on élimine seulement le groupe N-H, car la formule brute ne contient pas de nitrogène.

Le spectre RMN de proton donné une idée sur l'existence de cycle benzénique et groupe méthyle.

L'existence de cycle benzénique monosubstituée est claire à cause des fragments caractéristiques de benzène, le déplacement de proton de celle-ci, le nombre de DBE et les groupes C=C et

C-H aromatique et  $\delta=7.29$  ppm. A partir du  $C_7H_7$  on peut tirer un résultat que le cycle aromatique est lié avec  $CH_2$  ou carbone. Le fragment  $C_2H_5$  signalé à l'existence de éthyle, si on trouve le fragment  $Ar-C(CH_3)_2$  de  $m/z = 119$  (le pic de base) avec l'éthyle obtient une formule développée  $Ar-C(CH_3)_2CH_2CH_3$ . C'est la formule la plus appropriée pour les spectres de masse, infrarouge et ultraviolet. Le spectre RMN est en accord avec cette formule,  $\delta=0.9$  ppm : représente le déplacement de proton :  $CH_3-C$  (méthyle lié avec méthylène),  $\delta=1.5$  ppm représente le déplacement de proton :  $CH_2-C$  (méthylène lié avec méthyle) est  $\delta=1.25$  représente le déplacement des six protons des groupes méthyle.



Tertioamylbenzène

Par comparaison, cette formule développée trouvée est identique avec la formule développée du composé qui donne ces caractéristiques spectrales.

◆ **Exemple N° 3 :**

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 116. Le pic  $M+1$  présente une intensité relative de 5.75 % et le pic  $M+2$  d'intensité 1.4 %.

Le programme donné au début une liste de 29 composés de masse molaire est égale à 116. Les composés sont :

C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>  
 C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub>  
 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>N<sub>4</sub>O<sub>2</sub>  
 C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>NO<sub>4</sub>  
 C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>  
 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>N<sub>4</sub>O  
 C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>3</sub>  
 C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>NO<sub>3</sub>  
 C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>  
 C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>N<sub>3</sub>O  
 C<sub>4</sub>H<sub>12</sub>N<sub>4</sub>

C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>  
C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>NO<sub>2</sub>  
C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O  
C<sub>5</sub>H<sub>14</sub>N<sub>3</sub>  
C<sub>5</sub>N<sub>4</sub>  
C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>2</sub>  
C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>NO  
C<sub>6</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>  
C<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O  
C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>N<sub>3</sub>  
C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>O  
C<sub>7</sub>O<sub>2</sub>  
C<sub>7</sub>H<sub>2</sub>NO  
C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>  
C<sub>8</sub>H<sub>4</sub>O  
C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>N  
C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>

L'utilisation de l'isotope M+1 % et M+2 % permet d'obtenir le composé suivant : C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>  
Donc ; la formule brute du composé est C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>.

Pour le spectre de masse on recherche la structure des principaux fragments perdus de ce composé, les rapports m/z des principaux fragments les plus importants sont : 29, 45 et 43 comme pic de base, on trouve les fragments perdus suivantes : Pour 29:C<sub>2</sub>H<sub>5</sub> et CHO, 45: CH<sub>3</sub>CHOH, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, CH<sub>2</sub>OCH<sub>3</sub> ou OHC=O.

Pour le spectre ultraviolet visible, à partir le programme, on obtient la valeur de DBE=2 est identique avec la valeur du composé qui donne le spectre.

Pour le spectre infrarouge en recherche les principaux groupes fonctionnels observés dans ce composé, les bandes caractéristiques observées sont : pic large de 2500 cm<sup>-1</sup> 3320 cm<sup>-1</sup>, 1715 cm<sup>-1</sup>, 1730 cm<sup>-1</sup>, 1180 cm<sup>-1</sup>, 1350 cm<sup>-1</sup>, a partir de ces données on trouve : C-C dans les alcanes, O-H associée dans les acides carboxylique, C=O dans les acide carboxyliques, les aldéhydes ou dans les carbonyles, C-O dans les esters, les acides carboxyliques ou les alcools.

Le spectre de masse donne une formule brute C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub> ainsi les formules des principaux fragment perdus.

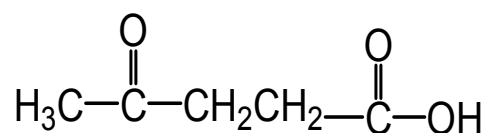
Le spectre ultraviolet visible donne une valeur de DBE=2, cette valeur n'est pas la valeur observée dans le spectre ultraviolet de ce composé (DBE=1).

Le spectre infrarouge donne les groupes fonctionnels existent.

Le spectre infrarouge indique un acide aliphatique (n'existe pas des doubles C=C). Nous remarquons un pic important et large, dû à la vibration de valence OH. Deux bandes C=O, le premier confirme la présence d'une acide et le deuxième confirme la présence d'un groupe carbonyle (on élimine l'aldéhyde selon le spectre de masse). Le fragment  $m/z=45$  c'est le fonction acide de ce composé, En envisageant un acide à fonction cétone, nous remarquons que le pic de base (masse 43) peut être attribué au groupement  $\text{CH}_3\text{-C=O}$  ou  $\text{C}_3\text{H}_7$ . La somme des fragments  $\text{CH}_3\text{C=O}$ ,  $\text{C}_3\text{H}_7$  et  $\text{COOH}$  est 88. Il nous reste une masse 28 qui est  $\text{CH}_2\text{CH}_2$ .

Donc, il y a deux formules développés possible :  $\text{CH}_3\text{-CO-CH}_2\text{CH}_2\text{-COOH}$  et  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CO-COOH}$ .

Le spectre  $^1\text{H-RMN}$  fixe définitivement notre choix : un déplacement chimique à  $\delta=2.12$  ppm représente le groupement méthyle adjacent au groupement carbonyle, on outre un déplacement à  $\delta=11.0$  ppm c'est le déplacement de proton acide, la structure s'écrit donc :



Acide lévulinique

Cette formule développée trouvée est identique avec la formule développée du composé qui donne ces caractéristiques spectres.



**◆ Exemple N° 4 :**

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 73. Le pic M+1 présente une intensité relative de 5.5 % et le pic M+2 d'intensité 0.2 %.

Le programme donne au début une liste de 14 composés de masse molaire est égale 73. Les composés sont :

HN4O  
CHN2O2  
CH3N3O  
CH5N4  
C2HO3  
C2H3NO2  
C2H5N2O  
C2H7N3  
C3H5O2  
C3H7NO  
C3H9N2  
C4H9O  
C4H11N  
C6H

L'utilisation de l'isotope M+1 % et M+2 % permet d'obtenir le composé suivant : C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N  
Donc ; la formule brute de ce composé est C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N.

Pour le spectre de masse on recherche les structures des principaux fragments perdus de ce composé, les rapports m/z des principaux fragments les plus importants sont : 29 et 30 (comme pic de base), on trouve les fragments perdus suivants : CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub> ou NO, C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>. On élimine le fragment NO car la formule brute ne contient pas d'un atome d'oxygène.

Pour le spectre infrarouge en recherche les principaux groupes fonctionnels observés dans ce composé, les bandes caractéristiques observées sont : deux pics 3367 cm<sup>-1</sup> et 3279 cm<sup>-1</sup>, 1603 cm<sup>-1</sup>, 1390 cm<sup>-1</sup>, a partir ces donnés on trouve : N-H dans les amine primaire, OH dans les alcools et les phénols, C-C dans les alcanes, N-H (vibration de déformation) dans les amines.

Pour le spectre ultraviolet visible, à partir le programme, on obtient que ce composé soit saturé (DBE=0).

Le spectre de masse de masse donné une formule brute C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N ainsi les formules des principaux fragment perdus.

Le spectre ultraviolet visible donné une valeur de DBE=0, cette valeur est identique à celle-ci observée pour le spectre ultraviolet de ce composé.

Le spectre infrarouge donné les groupes fonctionnels existent.

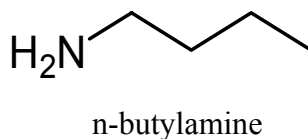
Le pic de base dont la masse est (fragment caractéristique pour les amine), fait penser à une amine aliphatique (n'existe pas des insaturations). Dans le spectre infrarouge, indique alors que cette amine est primaire (deux bande) et confirmé par l'absorption de N-H dans la zone de déformation.

Le fragment 30 est  $\text{CH}_2\text{NH}_2$ , il nous reste une masse de 43 est donc exactement  $\text{C}_3\text{H}_7$ .

Les formules probables sont :  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2$ ,  $(\text{CH}_3)_3\text{NH}_2$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{CH}_2\text{NH}_2$

Le signal du spectre  $^1\text{H}$ -RMN situé à  $\delta=2.64$  semble représente un groupe  $\text{CH}_2$  adjacent à un  $\text{NH}_2$ . On élimine la deuxième formule, un déplacement à  $\delta=0.91\text{ppm}$  représente le proton de méthyle adjacent avec  $\text{CH}_2$ , il nous reste une masse de 28 qui est exactement  $\text{CH}_2\text{CH}_2$ .

La structure s'écrit donc :



Par comparaison, cette formule développée trouvée est identique avec la formule développée du composé qui donne ces propriétés spectrales.

#### ♦ Exemple N° 5 :

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 126. Le pic  $M+1$  présente une intensité relative de 7.02 % et le pic  $M+2$  d'intensité 0.81 %.

Le programme donne au début une liste de 27 composés de masse molaire est égale 73. Les composés sont :

$\text{C}_3\text{N}_3\text{O}_3$   
 $\text{C}_3\text{H}_2\text{N}_4\text{O}_2$   
 $\text{C}_4\text{NO}_4$   
 $\text{C}_4\text{H}_2\text{N}_2\text{O}_3$   
 $\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_3\text{O}_2$   
 $\text{C}_4\text{H}_6\text{N}_4\text{O}$   
 $\text{C}_5\text{H}_2\text{O}_4$   
 $\text{C}_5\text{H}_4\text{NO}_3$

C5H6N2O2  
C5H8N3O  
C5H10N4  
C6H6O3  
C6H8NO2  
C6H10N2O  
C6H12N3  
C7H10O2  
C7H12NO  
C7H14N2  
C7N3  
C8H14O  
C8H16N  
C8NO  
C8H2N2  
C9H18  
C9H2O  
C9H4N  
C10H6

Si on utilise l'intensité isotopique  $M+1$  % et  $M+2$  %, on obtient le composé suivant :  $C_5H_{10}N_4$ .

Cette formule ne présente aucune similitude avec les spectres de composé analysé, le spectre infrarouge apparaît la différence entre la formule du composé analysé et la formule de composé obtenus à partir le programme, dans le spectre de composé analysé n'existe pas une absorption caractéristique pour le nitrogène quelque soit l'atome liée avec celle-ci et une bande intense vers  $1230\text{ cm}^{-1}$  qui être associées à l'absorption C-O, par contre aucun atome d'oxygène dans la formule  $C_5H_{10}N_4$ .

Par comparaison, cette formule brute trouvée est n'est pas identique avec la formule brute du composé qui donne ces propriétés spectrales.

**◆ Exemple N° 6 :**

Le pic moléculaire du spectre de masse indique une masse moléculaire de 138. Le pic M+1 présente une intensité relative de 8.99 % et le pic M+2 d'intensité 0.82 %.

Le programme donné au début une liste de 28 composés de masse molaire est égale 138. Les composés sont :

C3H10N2O4  
C4N3O3  
C4H2N4O2  
C5NO4  
C5H2N2O3  
C5H4N3O2  
C5H6N4O  
C6H2O4  
C6H4NO3  
C6H6N2O2  
C6H8N3O  
C6H10N4  
C7H6O3  
C7H8NO2  
C7H10N2O  
C7H12N3  
C8H10O2  
C8H12NO  
C8H14N2  
C8N3  
C9H14O  
C9H16N  
C9NO  
C9H2N2  
C10H18  
C10H2O  
C10H4N  
C11H6

Si on utilise l'intensité isotopique M+1 % et M+2 %, on obtient le composé suivant :

$C_8H_{10}O_2$ .

Pour le spectre de masse on recherche les structures des principaux fragments perdus de ce composé, les rapports m/z des principaux fragments les plus importants sont : 31, 45, 51, 65, 77 et 94 (comme pic de base), on trouve les fragments perdus suivantes CH<sub>2</sub>OH ou OCH<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH, C<sub>4</sub>H<sub>3</sub>, C<sub>5</sub>H<sub>5</sub> et C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>.

Le spectre ultraviolet visible donné une valeur de DBE=4, cette valeur est identique avec la valeur observée dans le spectre ultraviolet de ce composé (DBE=4).

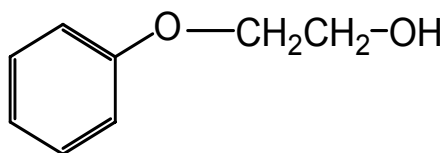
Pour le spectre infrarouge en recherche sur les principaux groupes fonctionnels observés dans ce composé, les bandes caractéristiques observées sont :  $1245\text{ cm}^{-1}$ ,  $2980\text{ cm}^{-1}$ ,  $3058\text{ cm}^{-1}$ ,  $3390\text{ cm}^{-1}$ ,  $1460\text{ cm}^{-1}$ ,  $1550\text{ cm}^{-1}$ ,  $700$  et  $750\text{ cm}^{-1}$  à partir ces données on trouve : N-H soit OH dans les alcools et les phénols, C-C dans les alcanes, C=C dans les cycle aromatique, C-O dans les alcools primaire ou secondaire, C-O dans les esters et éthers, C-H dans les cycles aromatique ou les alcènes, C-H dans les alcanes.

Le spectre de masse de masse donné une formule brute  $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_2$  ainsi les formules des principaux fragment perdus.

Le spectre ultraviolet visible donné une valeur de  $\text{DBE}=4$ , cette valeur est identique à celui-ci observée pour le spectre ultraviolet de ce composé.

Le spectre infrarouge donné les groupes fonctionnels existent, on élimine le cas de N-H puisque la formule brute ne contient pas le nitrogène et le cas de l'ester (absence d'absorption  $\text{C}=\text{O}$ ).

Notons les masses 51, 65, 77 et 78 caractérisant le cycle benzénique, monosubstituée (deux absorptions vers  $700$  et  $750\text{ cm}^{-1}$ ) et l'absorption des protons benzéniques depuis  $\delta=7.3$  ppm jusqu'à  $\delta=6.8$  ppm, le pic 31 caractéristique pour les alcools primaires ou secondaires. Le pic de base du spectre de masse est à 94. Celui-ci résulte puisque sa masse est paire, soit d'un réarrangement, soit par double scission. Le fragment le plus approprié pour ce réarrangement est  $\text{Ar-O}+\text{H}$  résulte du classique scission avec réarrangement d'hydrogène rencontré pour ce type d'éther. Il nous reste une masse de 45 c'est le fragment  $\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$  ou  $\text{CH}_3\text{CH}_2(\text{OH})$ . Un pic situé à  $\delta=6.8$  ppm est également le déplacement du groupe méthylène lié avec OH, et on élimine le cas d'alcool secondaire n'apparaît pas un déplacement du groupe méthyle dans le spectre de proton qui est égal 2.4 ppm. Donc la structure finale :



Phénoxy-2 éthanol

Par comparaison, cette formule développée trouvée est identique avec la formule développée du composé qui donne ces propriétés spectrales.

### II.3 Discussion des résultats

D'après l'étude de quelques problèmes spectrales par le programme réalisé et la comparaison de ces résultats avec les formules développées de ces composés, on note quelques remarques concernant ces résultats.

Dans chaque cas, la première étape sera d'établir une formule brute en fonction des valeurs du pic moléculaire et de la contribution isotopique.

En principe, une formule brute peut être déterminée par la seule mesure précise de la masse moléculaire. C'est ainsi que si nous disposons d'un pouvoir de résolution suffisant, nous pouvons distinguer les uns des autres, les groupes CO, N<sub>2</sub>, CH<sub>2</sub>N et C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> qui correspondent pourtant tous à un même nombre de masse égal à 28. Chaque composé possède une abondance isotopique M+1% et M+2% caractéristique, on basant sur cette idée pour déterminer une seule formule brute. Mais des fois, les pics M+1 et M+2, résultant des contributions isotopiques apparaissent avec des intensités plus élevées que ne laisserait supposer les abondances réelles des divers isotopes. Ce phénomène peut être la conséquence d'un pouvoir de résolution insuffisant ou plus simplement de la présence d'impuretés, donc il perturbe la sélection de la formule brute d'après les abondances isotopiques. C'est le cas de la masse molaire est égale à 126 et M+1=7.02 %, M+2=0.81, où la sélection de la formule brute exacte n'est effectuée pas par le programme car les valeurs de M+1% et M+2% ne sont pas les valeurs réelles de ce composé. Mais dans le cas général, le programme donne des résultats des formules brutes identiques avec les formules des composés donnés des spectres de masse.

Le spectre ultraviolet donne une idée sur la sélection de la formule brute du composé, par exemple, le programme sélectionne une formule brute de C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O, il donne automatiquement le nombre des transitions électroniques (DBE). On compare cette valeur avec la valeur observée dans le spectre du composé analysé, l'égalité des deux valeurs donne une idée positive sur la sélection de ce composé.

Après la sélection de la formule brute d'un composé quelconque, on a le spectre infrarouge de ce composé pour déterminer les principaux groupes fonctionnels de celle-ci. L'aspect général du spectre infrarouge confirme la sélection de la formule brute de ce composé, par exemple le programme donne une formule brute de C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>O, il faut apparaître dans le spectre de masse une absorption de 1050 à 1300 de C-O cm<sup>-1</sup> ou de 1710 à 1750 de C=O cm<sup>-1</sup> ou de 3300 à 3600 cm<sup>-1</sup> de OH, si n'apparaît pas au moins une absorption de ces groupes on conclure que la sélection est fautive.

En peut maintenant proposé une formule développée quelque soit le composé analysé après des contributions entre trois spectres précédents. Après la proposition de la formule développée il faut confirmé avec le spectre RMN-<sup>1</sup>H et RMN-<sup>13</sup>C, si ces spectres sont identiques avec la formule proposé on peut dire que cette formule est correcte, si non on change la position des groupes de cette formule jusqu'à l'identité entre les deux formules.

# *Conclusion Générale*



## Conclusion générale

L'identification structurale des composés organiques présente une importance considérable dans tous les domaines de chimie tel que la chimie analytique, l'environnement, la pollution et le médical.

Pour cette raison dans ce travail on étudie la possibilité de calcul des propriétés spectrales des composés organiques à partir d'un programme informatique.

Les exemples interprétés présente des avantages pour ce programme tel que la détermination de la formule brute sauf quelques erreurs qui retour à l'existence des impuretés dans l'échantillon analysé, cette impureté modifier l'abondance isotopique et en fin n'obtient pas le composé considéré. Autre avantage c'est la détermination automatique de nombres d'insaturations (DBE) qui facilité la comparaison entre le composé donné par le programme et le composé analysé.

Le programme aussi déterminé les principaux groupes fonctionnels d'un composé analysé. Après tous ça on combine toutes les informations et proposé une formule développée, on utilise aussi  $^1\text{H}$ -RMN et  $^{13}\text{C}$ -RMN pour confirmer la proposition de la formule développée.

On général, la formule développée proposé à partir le programme est identique à la formule développée de composé analysé.

Ce travail est considéré comme la première imagination et bas pour réalisé un programme développée plus tôt un logiciel qui détermine les formules développées des composés organique à partir des données spectrales (spectre de masse, spectre ultraviolet, spectre infrarouge et spectre de résonance magnétique nucléaire de proton et carbone treize)

# *Références bibliographiques*

## Références bibliographiques

- [1] H. David., Russell., D. Ricky., Edmondson., High-resolution Mass Spectrometry and Accurate Mass Measurements with Emphasis on the characterization of Peptides and Proteins by Matrix-assisted Laser Desorption/Ionization Time-of-Flight Mass Spectrometry.
- [2] Z.T. Cherif., Méthodes spectroscopiques d'analyses chimiques, office de publication universitaire. 09-1994.
- [3] J. De Grave., F. Berthou., M. Prost., P. Arpino et J.C. ., Promé-Méthodes chromatographiques couplées à la spectrométrie de masse. 1986
- [4] P. Longevialle., Principe de la spectrométrie de masse des substances organiques. 1981
- [5] Franci Rouessac., Annick Rouessac., Guy Ourisson., Analyse chimique. Méthodes et techniques instrumentales modernes. 5<sup>ème</sup> édition, Paris, 2000.
- [6] Manfred Hesse., Herbert Meier., Bernz Zeeh., Méthodes spectroscopiques pour la chimie organique. Masson, Paris, 1997.
- [7] R.M. Silverstein., G.C. Bassler., C. Morrill., Identification spectrométriques de composés organiques. 5<sup>e</sup> édition, 1991.
- [8] Laurence M., Harwood and Timothy D. W., Claridge-Introduction to organic spectroscopy Oxford Chemistry Primers 43 Oxford Sciences Publication.
- [9] Jhon M., Brown, Molecular Spectroscopy. Oxford Chemistry Primers 55 Oxford Sciences Publication.
- [10] P.W. Atkins., Physical Chemistry, Oxford University Press (Existe en version française)
- [11] Dudley H. Williams and Ian Fleming., Spectroscopic methods in organic chemistry, McGRAW-HILL Book Compagny (UK).
- [12] M. Hamon., F. Pellerin., M. Guernet., G. Mahuzier ., Méthodes spectrales et analyse organique. 2<sup>e</sup> édition, tome 3.
- [13] Jacques. D., Jean. B, Jean. C., Physico-chimie des lubrifiants. Analyses et essais, édition 1997.
- [14] Paul Arnaud., Chimie physique, cours et exercices corrigés. 5<sup>e</sup> édition. Revue par, Françoise Rouquérol, Gilberte Chambaud, Roland Lissillour. 2001.

- [15] G. M. Barrow., préface de Pr. G. Pannetier., Chimie physique, base de la thermodynamique chimique, étude de la liaison chimique. Tome 1.1991.
- [16] Peter. W., Atkins., Chimie physique. Traduction de 6<sup>e</sup> édition anglaise par Monique Mottet. Paris : janvier 2000.
- [17] Jean-René Lalanne., François Carmona et Laurent Servant., Spectroscopies optiques d'absorptions électronique.
- [18] Peter. W. Atkins., les concepts de chimie physique. Paris 1998.
- [19] Skoog, Holler., Nieman., principe d'analyse instrumentale. Traduction et révision scientifique de la 5<sup>ème</sup> édition américaine par Claudine buess-Herman et Freddy Dumont., 2003.
- [20] Y. Cohen., avec le colobatoire de M. Adolphe., Pharmacologie moléculaire. 1978.
- [21] George Socrates., Infrared characteristic group frequencies., Tables and charts., 1994.
- [22] R. D. Hill., G. D. Meakins, J. Chem Soc., p 761
- [23] F. F. Bentley., E. F. Wolfarth, Spectrochim. Acta. 15, 165
- [24] A. A. Petrov., G. I. Semenov, J. Gen. Moscow, 27, 2974.
- [25] Y. A. Matatsu., Y. Hamada., M. Tsuboi, J. Mol. Spectrosc., 1987, 123, 276.
- [26] R. A. Nyquist, The Interpretation Of Vapour-Phase Spectra, Sadtler, 1985.
- [27] R. A. Nyquist et al., Appl. Spectrosc., 1991, 45, 92, 860, 1075.
- [28] R. A. Nyquist et al., Appl. Spectrosc., 1990, 44, 426.
- [29] W. K. Surewiz et al., Biochemistry, 1993, (32) 2, 389.
- [30] I. Murray and I. A. Cowe., Making Light Work: Advance in Near Infrared Spectroscopy, VCH, Weinheim, 1992.
- [31] K. A. B. Lee., Appl. Spectrosc. Rev., 1993, (28) 3, 231.
- [32] L. M. Jackman, S. E. T. Sternhell., Applications of NMR spectroscopy in organic chemistry. 2<sup>ème</sup> éd. New-York: Academic, 2<sup>ème</sup> éd, 1980.
- [33] E. D. Becker., High resolution NMR, An introduction to proton nuclear magnetic resonance spectrometry. San Francisco: Holden-day, 1976.
- [34] Varian Associates, High resolution NMR spectra catalogue, Vol.1, 1962; Vol.2, 1963.

- [35] C.J. Pouchert., Aldrich library of NRM spectra, Vol. 1 et 2, Milwaukee, WI: Aldrich, 1983.
- [36] F.A. Bovey., NRM data tables for organic compounds. Vol.1, New-York: Wiley-Interscience, 1967.
- [37] N.F. Chamberlain., The practice of NRM spectroscopy with spectra-structure correlation for  $^1\text{H}$ . New-York: Plenum, 1974.
- [38] J.K. Sanders, B.K. Hunter., Modern NRM spectroscopy. Oxford: Oxford university press, 1987.
- [39] G.C. Levy, R.L. Lichter ET G.L. Nelson., Carbon-13 nuclear magnetic resonance for organic chemists, 2<sup>ème</sup> éd. New-York: Wiley, 1980.
- [40] E. Breitmaier, W. Voelter., Carbon-13 NRM spectroscopy, 3<sup>ème</sup> éd. New-York: VCH Publishers, 1987.
- [41] E. Pretsch, T. Clerc, J. Seibl et W. Simon., Spectra data for structure determination of organic compounds, Berlin : Springer-Verlag, 1981.
- [42] W. Bremser, L. Ernst, B. Franke, R. Gerhards et A. Hardt. Carbon-13 NRM spectral data (microfiche). New-York: VCH Publishers, 4<sup>ème</sup> éd. 1987 (58108 spectres de 48357 composés sous forme de tableau).

**Résumé :**

Ce travail de recherche rentre dans le cadre de développement de logiciel de Calcul des propriétés spectroscopiques des composés organiques en se basant sur les caractéristiques spectrales des molécules.

Généralement dans la recherche de la structure chimique des composés organiques ont recourt le plus souvent à différentes techniques d'analyses spectrales tel que : La spectrométrie de masse, l'infrarouge, l'ultra violet et la résonance magnétique nucléaire du proton et du carbone treize, le programme développé utilise une banque de données qui aide à régler le problème de la détermination de la structure des molécules organiques à partir de leurs données spectrales.

Le programme réalisé utilise le langage Fortran 90, il est constitué de plusieurs bases de données, chacune correspondant à une méthode d'analyse. A partir des données spectrales il donne les propriétés correspondantes.

**Mots clés :** Spectroscopie des composés organiques, SM, UV, IR, RMN, Simulation.

**Abstract:**

This work of research goes in the setting of development of software of Calculation of the spectroscopic properties of the organic compounds while being based on the spectral features of the molecules.

Generally in the research of the chemical structures of the organic compounds have resorted the most often to techniques of spectral analyses as: The spectrometry of mass, the infrared, the ultraviolet and the nuclear magnetic resonance of the proton and the carbon thirteen, the developed program uses a data base of given them that helps to settle the problem of the determination of structure of the organic molecules from given them spectral.

The achieved program uses the language Fortran 90; it is constituted of several bases of given, each correspondent to a method of analysis. From given them spectral it gives the corresponding properties.

**Key words:** Spectroscopy, MS, UV, IR, RMN, Simulation.