

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

**MATHEUS AUGUSTO MILEK
MATHEUS DOS SANTOS MACEDO**

**DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA O CÁLCULO DA VARIAÇÃO
DA ENTALPIA DE UMA SÉRIE DE COMPOSTOS ORGÂNICOS**

PONTA GROSSA

2022

MATHEUS AUGUSTO MILEK
MATHEUS DOS SANTOS MACEDO

**DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA O CÁLCULO DA VARIAÇÃO
DA ENTALPIA DE UMA SÉRIE COMPOSTOS ORGÂNICOS**

**Development of a program to calculate the enthalpy variation of several
organic compounds**

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentado como requisito para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química da Universidade
Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).
Orientador(a): César Augusto Canciam.

PONTA GROSSA
2022



Esta licença permite remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, para fins não comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es) e que licenciem as novas criações sob termos idênticos. Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.

MATHEUS AUGUSTO MILEK
MATHEUS DOS SANTOS MACEDO

**DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA O CÁLCULO DA VARIAÇÃO
DA ENTALPIA DE UMA SÉRIE COMPOSTOS ORGÂNICOS**

Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação
apresentado como requisito para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química da Universidade
Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Data de aprovação: 16/Novembro/2022

César Augusto Canciam
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Everton Moraes Matos
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Thiago Peixoto de Araújo
Doutorado
Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

PONTA GROSSA

2022

RESUMO

O cálculo da variação da entalpia é fundamental na resolução dos mais variados problemas, pois está atrelado ao balanço energético, muito presente no estudo da Engenharia Química, e importante para o entendimento das transformações que ocorrem num determinado sistema. A inserção de ferramentas dentro da engenharia, tais como programas para cálculos de diferentes propriedades, que apresentem dados confiáveis e uma interface de fácil entendimento, é de extrema importância para uma rápida obtenção dos resultados desejados. Para tanto, esse trabalho visa desenvolver um algoritmo de cálculo do calor específico a pressão constante e posteriormente da variação de entalpia de compostos orgânicos dentro do ambiente MATLAB®. Os dados necessários para a realização do cálculo se encontram numa base de dados que interage com o programa. A metodologia utilizada é classificada como pesquisa ação, pois a partir de um problema específico é desenvolvido uma aplicação prática.

Palavras-chave: entalpia; calor específico; MATLAB®; programa.

ABSTRACT

The calculation of enthalpy variation is fundamental in solving various problems, because it is linked to the energy balance, very present in the study of Chemical Engineering, and important for the understanding of the transformations that occur in each system. The insertion of tools within engineering, such as programs for calculating different properties, which present reliable data and an easy-to-understand interface, is of extreme importance to quickly obtain the desired results. Therefore, this work aims to develop an algorithm to calculate the specific heat at constant pressure and then the enthalpy variation of organic compounds within the MATLAB® environment. The data necessary to perform the calculation is found in a database that interacts with the program. The methodology used is classified as action research, because a practical application is developed from a specific problem.

Keywords: enthalpy; heat capacity; MATLAB®; program.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Sistema fechado e energias envolvidas.....	12
Figura 2 - Área de trabalho inicial do MATLAB®.....	15
Figura 3 - Fluxograma de desenvolvimento do programa.....	17
Figura 4: Fluxograma de experiência do usuário.....	18
Figura 5 - Imagem do “Extract Table” para importar dados de imagens como tabela.....	19
Figura 6 - Tela inicial do MATLAB App Designer	21
Figura 7 - Tela inicial do programa	22
Figura 8 - Funções "callbacks"	22
Figura 9 - Mostrar toda tabela	23
Figura 10 - Inserção de temperaturas e seleção do composto	24
Figura 11 - Resultado do cálculo para o usuário.....	24
Figura 12 - Tela para instalação	25
Figura 13 - Alocação do aplicativo no MATLAB	25

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Q	Calor
Cp	Calor específico a pressão constante
Ek	Energia Cinética
U	Energia Interna
Ep	Energia Potencial
H	Entalpia
W	Trabalho
TCC	Trabalho de Conclusão de Curso

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
1.1	Contextualização	9
1.2	Objetivos	10
1.3	Justificativa.....	10
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
2.1	Balanco de Energia	11
2.1.1	Conceitos	11
2.1.2	Balanco de energia em um sistema fechado.....	11
2.2	Entalpia	13
2.3	Calor específico.....	13
2.4	MATLAB®.....	15
3	MATERIAIS E MÉTODOS	16
3.1	Classificação da pesquisa.....	16
3.2	Método de execução	16
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	19
4.1	Base de dados	19
4.2	Importação para o MATLAB®.....	20
4.3	App Designer	20
4.4	Uso do programa.....	22
4.5	Distribuição.....	25
5	CONCLUSÃO	26
5.1	Sugestões de Melhoria	26
	REFERÊNCIAS.....	28
	APÊNDICE 1 - Chemical properties handbook - Heat Capacity of gas – organic compounds (YAWS, 1999)	30
	APÊNDICE 2 – Código do programa.....	49
	APÊNDICE 3 – Termo de doação	63

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contextualização

As transformações da matéria e da energia estão presentes na Engenharia Química. Desse modo, os balanços são cálculos fundamentais para o entendimento dos processos químicos. Uma das formas de energia é a entalpia, pois esses balanços de energia podem ser escritos em termos da entalpia (CREMASCO, 2015; FONSECA & EGAS, 2009).

A entalpia facilita as discussões das reações químicas, devido as suas variações, isto é, de um estado inicial para um estado final, estas variações são identificadas como a energia transferida em forma de calor em sistemas mantidos a pressão constante. Contudo, para que seja possível realizar o balanço de energia é necessário originar os valores que aparecem na expressão da função entalpia, com base nas propriedades macroscópicas do sistema (ATKINS, 2017; FONSECA & EGAS, 2009).

Com o avanço da tecnologia, cada vez mais se faz necessário que o engenheiro químico esteja apto e familiarizado com o uso de *softwares* e ferramentas que o auxiliem a encontrar de maneira rápida as respostas para problemas tanto no ambiente acadêmico, quanto no industrial. O perfil do engenheiro deve ser diverso e centrado na resolução das demandas requisitadas, sendo um dos pontos principais a absorção e desenvolvimento de novas tecnologias para essa resolução de problemas (CREMASCO, 2015).

O MATLAB® é amplamente utilizado em universidades e faculdades dos mais diversos cursos que tem como base a matemática e especialmente, cursos de engenharia. Dentro do âmbito industrial, o *software* já é reconhecido como uma ferramenta de pesquisa e para desenvolvimento de projetos (GILAT, 2012).

Para tanto, utilizando o *software* de cálculos matemáticos MATLAB®, pode-se compilar uma grande base de dados e utilizar para o cálculo da variação de entalpia de uma série de compostos orgânicos, reduzindo o tempo de busca pelas informações e resolução dos problemas envolvendo entalpia.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

Desenvolver um programa para o cálculo da variação da entalpia de uma série de compostos orgânicos.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Compilar as informações necessárias dos diferentes compostos orgânicos em um banco de dados;
- Criação de um *layout* no programa para a inserção dos dados e a visualização das respostas pelo usuário.

1.3 Justificativa

A necessidade de dados de compostos orgânicos, principalmente para cálculos envolvendo balanços de energia, ainda apresenta a dificuldade da realização de cálculos manualmente e com a consulta direta a publicações que forneçam dados. Diante dessa dificuldade, realizar a compilação de dados relacionados a uma série de compostos orgânicos e construir um programa de fácil utilização para o usuário, pode reduzir o tempo de acesso para pesquisadores e estudantes que necessitem desse dado.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Balanço de Energia

2.1.1 Conceitos

A Termodinâmica surgiu no século XIX com a necessidade de descrever o comportamento básico das operações das máquinas a vapor, relacionando o trabalho gerado pela quantidade de calor fornecida ao sistema. Das observações experimentais surgiu a Primeira Lei da Termodinâmica, postulada como o “Princípio da conservação de energia”, que diz que a energia não pode ser criada nem destruída, mas sim transformada em outros tipos de energia (SMITH *et al.*, 2020; COELHO, 2016).

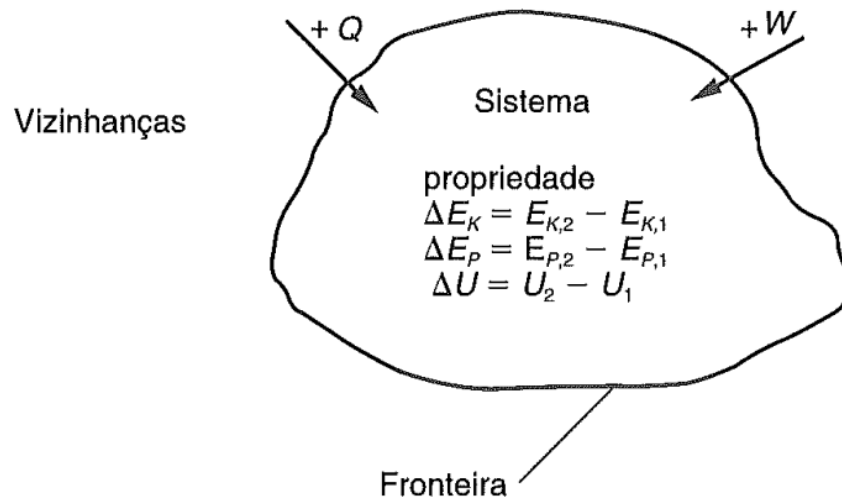
A energia total no sistema pode se apresentar nas formas de energia cinética (E_k), que estão relacionadas ao movimento do sistema relativamente a um referencial, energia potencial (E_p) que é a energia armazenada devido a posição da massa do sistema em relação a um referencial no campo gravitacional e a energia interna (U) que vem dos mais diferentes movimentos e interações das espécies químicas no sistema (FONSECA & EGAS, 2009).

2.1.2 Balanço de energia em um sistema fechado

As trocas de energia entre o sistema fechado e a vizinhança se dão pelo trabalho (W) em que o caso mais comum na Termodinâmica é uma força atuando sobre a fronteira do sistema, expandindo ou o comprimindo, e a outra forma é o calor (Q) que é a energia transferida de um corpo para outro devido ao gradiente de temperatura entre eles (KORETSKY, 2007; ÇENGEL; BOLES, 2013).

Na Figura 1 é ilustrado um sistema fechado e as energias envolvidas.

Figura 1 - Sistema fechado e energias envolvidas



Fonte: Koretsky (2007, p. 46)

Delimitando o espaço de observação a um sistema fechado e suas vizinhanças, tem-se então que a variação de energia dentro do sistema é igual a energia transferida entre as fronteiras do sistema (KORETSKY, 2007), conforme a Equação (1).

$$\Delta U + \Delta E_k + \Delta E_p = Q + W \quad (1)$$

Nos sistemas estacionários, que não sofrem variação de velocidade e altura, as variações das energias cinética e potencial são nulas (ÇENGEL; BOLES, 2013), como indicado na Equação (2).

$$\Delta U = Q + W \quad (2)$$

E utilizando a delimitação de sistema fechado com a composição constante, ou seja, as grandezas foram divididas pelo número de mol (na forma intensiva), a Equação (2) é reescrita na forma de (KORETSKY, 2007):

$$\Delta u = q + w \quad (3)$$

2.2 Entalpia

De acordo com a 1ª Lei da Termodinâmica, a quantidade de calor trocado a volume constante é igual a variação da energia interna em um sistema fechado. A definição de entalpia (H), portanto, é dada por:

$$H = U + pV \quad (4)$$

Em que p é a pressão do sistema e V o volume. Nessa definição, tem-se que U , p e V como funções de estado, o que significa que a entalpia também é uma função de estado, ou seja, a variação de entalpia não depende do processo que leva o sistema de um estado para o outro (MATSOUKAS, 2016; ATKINS, 2017).

A variação de entalpia num processo com pressão constante é igual a quantidade de calor transferida para o sistema, conforme a Equação (5).

$$\Delta h = q \quad (5)$$

A utilidade da propriedade entalpia é notada em balanços de energia para processos com escoamento, como por exemplo: reatores químicos e bioquímicos, colunas de destilação, compressores, turbinas, motores, entre outros, para calcular o calor e o trabalho nesses sistemas (SMITH *et al.*, 2020).

2.3 Calor específico

Segundo Smith (2019), dentro do estudo da Termodinâmica, o reconhecimento do calor como uma forma de energia em movimento foi aceito há tempos pela teoria de que gases, líquidos e sólidos têm uma determinada capacidade para o calor. Existe um conceito muito utilizado para poder mensurar a quantidade de calor que foi transferida para um sistema, o calor específico. Por definição, calor específico refere-se à energia necessária para aumentar a temperatura em um grau de uma unidade de massa de dada substância por meio de algum processo (ÇENGEL, 2009).

Geralmente, as informações que se buscam em relação ao calor específico são de dois tipos: calor específico a pressão constante e calor específico a volume constante. De acordo com o problema que for avaliado, é preciso notar qual das

variáveis é constante no sistema, em cada um dos casos as expressões resultantes possuem somente propriedades termodinâmicas. Portanto, conclui-se que calores específicos a volume e a pressão constante também são propriedades termodinâmicas (BORGNAKKE; SONNTAG, 2013).

Para um gás ideal, o calor específico depende apenas de uma variável, da temperatura. Em pressões baixas, nota-se que todos os gases reais se comportam de forma muito semelhante ao gás ideal. Dessa forma, os calores específicos se tornam dependentes apenas da temperatura. Logo, as expressões que representam, para um gás ideal a variação diferencial na energia interna u e entalpia h são (ÇENGEL, 2009):

$$du = c_v dT \text{ e } dh = c_p dT \quad (6)$$

Quando o calor específico num sistema em que a pressão é constante, mas o sistema pode se expandir devido ao aquecimento; neste caso, o balanço de energia é dado por (KORETSKY, 2007):

$$\Delta u = q + w \quad (7)$$

Como o sistema está realizando trabalho quando se expande, o balanço de energia contém um termo para o trabalho, é dado por:

$$\Delta u = q - P\Delta v \quad (8)$$

Logo, a Equação (8) pode ser reescrita como:

$$q = \Delta u + \Delta(Pv) \quad (9)$$

Sendo a pressão constante, assume-se que $\Delta P = 0$, logo:

$$\Delta(Pv) = P\Delta v + v\Delta P = P\Delta v \quad (10)$$

De acordo com a definição de entalpia, em um sistema fechado com pressão constante, tem-se:

$$\Delta h = q \quad (11)$$

Neste caso, um balanço de energia como foi apresentado na seção anterior sobre entalpia, define que o calor fornecido a pressão constante é igual à variação da entalpia. Portanto, a capacidade calorífica com pressão constante é definida:

$$c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_P \quad (12)$$

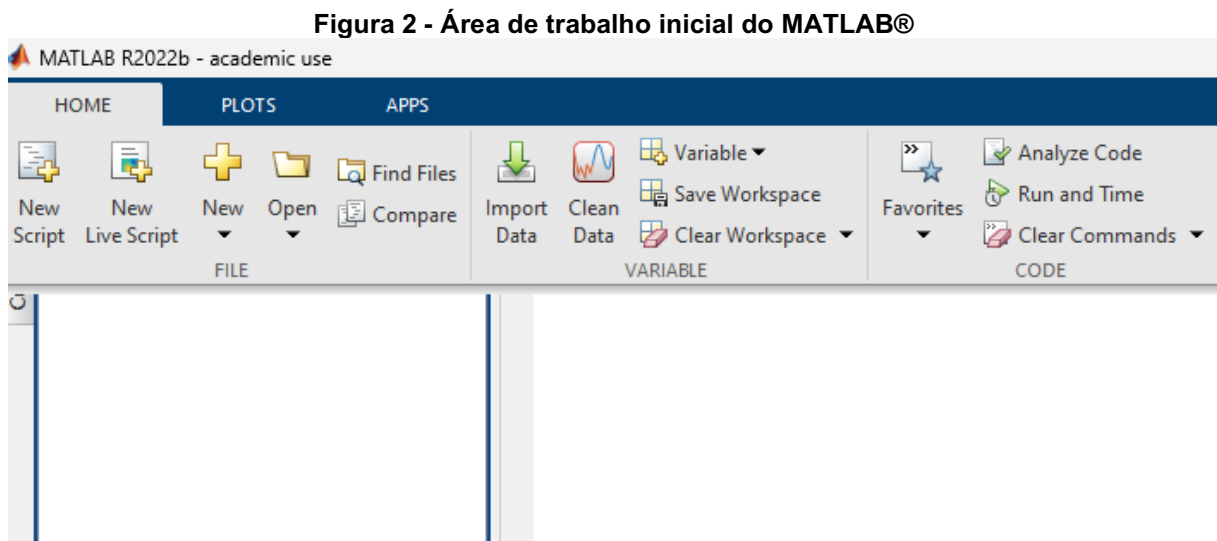
Considerando uma substância qualquer, por exemplo, pode-se ajustar à forma polinomial, dada por (YAWS, 1999):

$$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \quad (13)$$

Os valores para os coeficientes descritos encontram-se no Apêndice 1, de acordo como Yaws (1999).

2.4 MATLAB®

De forma concisa, o MATLAB® pode ser definido como um *software* cujos elementos básicos de trabalho são matrizes (MATSUMOTO, 2013). O programa se tornou muito utilizado nos cursos de engenharia, pois possui uma linguagem e lógica semelhante a linguagens de programação com C, Fortran, entre outras. Outro fator que o torna popular, é sua interface de fácil manuseio (PALM, 2013). Na Figura 2 são apresentadas algumas funções da tela inicial do MATLAB®:



Fonte: The Mathworks Inc (2022)

Existem diversas aplicações para o MATLAB®, incluindo análises de dados, modelamento matemático, desenvolvimento de algoritmos e aplicações, entre outros. Para o desenvolvimento dessas aplicações, o programa fornece uma grande gama de recursos como a sua biblioteca de funções com mais de 2.000 funções, e os seus recursos gráficos que ajudam na visualização melhor dos dados e respostas geradas (MATSUMOTO, 2013).

Um desses importantes recursos dentro do *software*, é a leitura e gravação de dados, por meio do utilitário *Import Data*. Por meio deste, consegue-se trazer bases de dados para o MATLAB® como Excel, Documento xml, entre outros que são reconhecidos pelo *software* e armazenados no tipo de variável mais adequada dentro do MATLAB® (MATSUMOTO, 2013).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Classificação da pesquisa

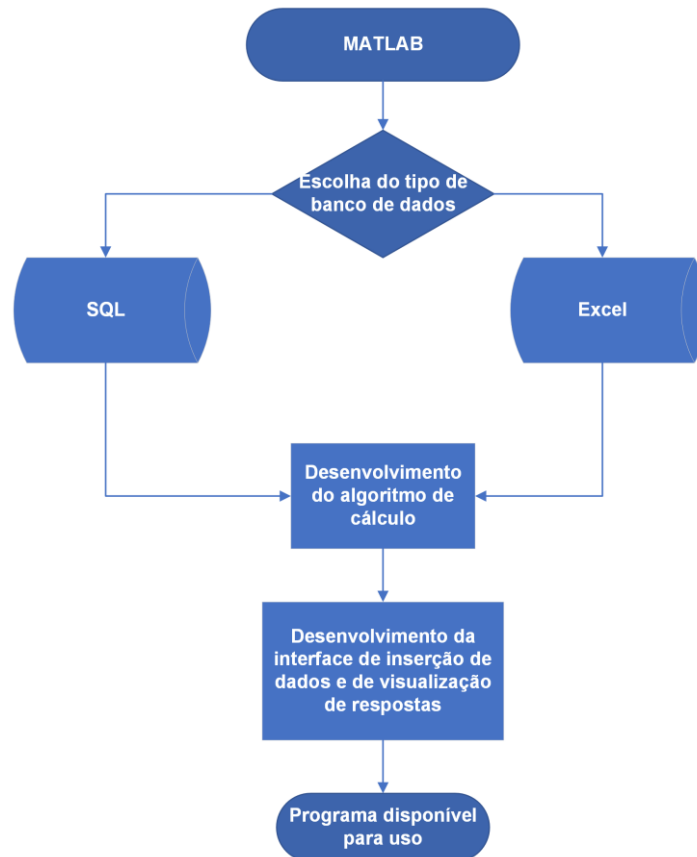
Essa pesquisa é do tipo aplicada, pois apresenta como objetivo gerar informação para aplicação prática, orientadas para solucionar problemas específicos (GERHARDT; SILVEIRA, 2009). Para este caso, será desenvolvido um código no MATLAB® que permita fornecer dados sobre variação da entalpia para vários compostos orgânicos.

Com base nos objetivos desta pesquisa, pode ser classificada como pesquisa-ação, já que tem características situacionais, pois procura diagnosticar um problema específico para uma situação específica, visando um resultado prático (GIL, 2022).

3.2 Método de execução

Para desenvolver este trabalho o método de execução da pesquisa será dividido em duas etapas gerais. A primeira contendo a estruturação do trabalho como um todo, desde a escolha do software que será utilizado. Nesse caso, já definido como o MATLAB®, até o desenvolvimento da interface e visualização de respostas que será fornecida pelo programa, como o raciocínio ilustrado na Figura 3.

Figura 3 - Fluxograma de desenvolvimento do programa

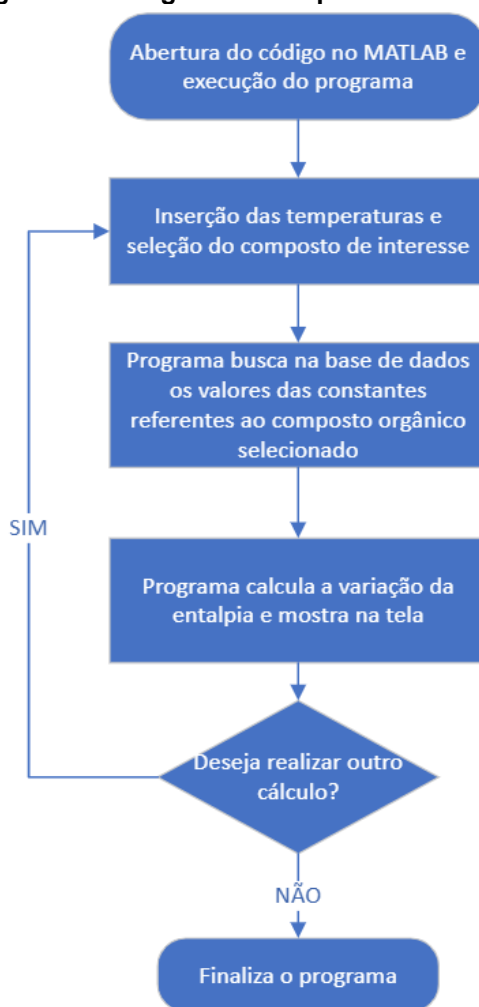


Fonte: os autores (2022)

Por meio desta visão macro ilustrada anteriormente, percebe-se que o processo de execução será constituído de quatro etapas. A primeira etapa que foi definida, a escolha do software. A segunda etapa que será estudar o tipo de banco de dados, logo em seguida, desenvolver o algoritmo de cálculo para aplicar no software e por último, a criação da interface de inserção de dados e de visualização de informações para que o programa possa ser disponibilizado.

O processo relativo ao desenvolvimento do algoritmo, que é a última etapa geral, consiste em estudar sobre as funcionalidades do MATLAB® em conjunto com a parte teórica presente neste trabalho, a qual deve-se determinar as variáveis de acordo com os dados inseridos pelo usuário ao abrir o programa, a ordem dos cálculos e o raciocínio dele, conforme pode ser visto na Figura 5.

Figura 4: Fluxograma de experiência do usuário



Fonte: os autores (2022)

O programa irá pedir ao usuário duas informações na tela inicial para poder entregar a resposta desejada. No primeiro momento, será pedido que insira qual o composto orgânico que deverá ser analisado. Os dados deste composto estarão armazenados na base conectada ao software. Logo em seguida, quais as temperaturas inicial e final da variação no processo. Será ressaltado para o usuário que a pressão do processo deve ser constante para que a variação de entalpia possa ser calculada por meio deste código.

Com a localização do composto na base de dados, o programa calculará o valor da variação da entalpia para o processo, apresentando o resultado na tela final. Por fim, o usuário pode realizar outro cálculo, caso deseje, repetindo o mesmo esquema lógico apresentado.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Base de dados

Os valores utilizados para o desenvolvimento dos cálculos se encontram no Apêndice 1, de acordo com Yaws (1999). Este apêndice conta com a informação de 1359 compostos orgânicos, e o primeiro passo foi a importação desses valores para uma base de dados digital. Como escolha dos autores, o programa utilizado como gerenciador dessa base de dados foi o Microsoft Excel (2016).

Para importação dos dados foram mapeadas quais seriam as formas mais utilizadas de automatizar o processo devido à grande quantidade de informações. Após realização de pesquisas por ferramentas online que fizessem essa leitura, optou-se pela ferramenta online “*Extract Table*” que possui uma versão de demonstração gratuita. Após a importação para o Microsoft Excel (2016), a base de dados foi tratada manualmente para a correção de possíveis erros no momento da conversão. A figura 5 ilustra o programa em execução.

Figura 5 - Imagem do “Extract Table” para importar dados de imagens como tabela

ExtractTable Why Us Pricing Resources FAQ Contact Web-PRO									
Table #: 1 Edit Table Character Accuracy: 82.86 Layout Accuracy: 75.75 Copy To Clipboard									
NO	FORMULA	NAME	A	.	c	D	E	TMN	TMAX
859	C8H18S	n-OCTYL MERCAPTAN	63,070	4.9322E-01	1.4077E-04	-3.4436E-07	1.144BE-10	200	1500
860	C8H18S	tert-OCTYL MERCAPTAN	-27,449	1.0002E+00	-7.2696E-04	2.4916E-07	-3.1819E-11	298	1500
861	C8H18S	BUTYL-SULFIDE	14,557	7.3830E-01	-3.2937E-04	5.2028E-08		298	1000
862	CBH18S	ETHYL-HEXYL-SULFIDE	12,005	7.6027E-01	-3.7040E-04	6.8300E-08		298	1000
863	CBH18S	HEPTYL-METHYL-SULFIDE	14,798	7.5722E-01	4.7374E-04	7.0492E-08		298	1000
864	CBH18S	PENTYL-PROPYL-SULFIDE	14,557	7.3839E-01	-3.2937E-04	5.2028E-08		298	1000
865	CBH18S2	BUTYL-DISULFIDE	20,391	8.3760E-01	4.7208E-04	1.0713E-07		298	1000
866	CBH19N	Di-n-BUTYLAMINE	-36,248	1.0025E+00	-7.8232E-	3.2620E-	-6.0071E-	298	1500

Fonte: os autores (2022)

Com os dados em formato de planilha partimos para a próxima etapa, que foi realizar a conexão destes dados da planilha para o MATLAB®.

4.2 Importação para o MATLAB®

O MATLAB® possui algumas maneiras de trazer dados feitos em outros arquivos para o *software* (PALM, 2013).

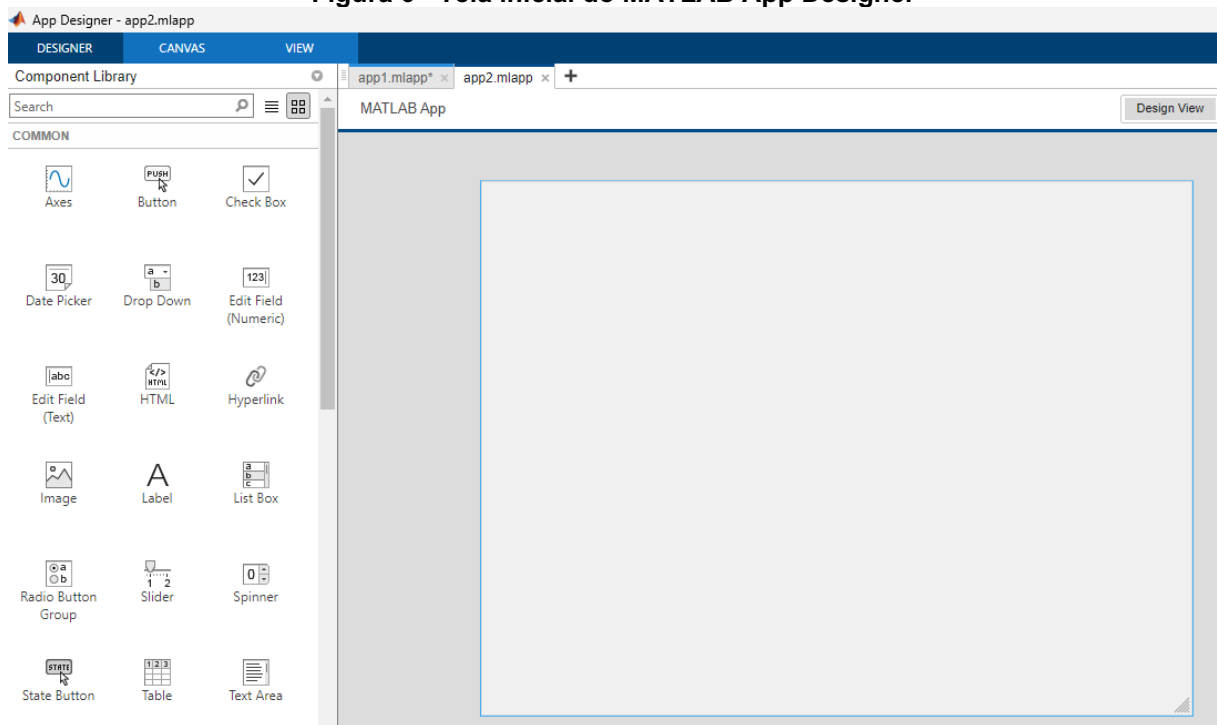
Como a base de dados utilizada para esse trabalho é externa ao MATLAB®, o programa deve importar e ler o arquivo para realização dos cálculos. Foi utilizado a “Central de Ajuda” do MATLAB® para certificar qual era a função mais adequada para ser inserida no código do programa, e segundo o suporte do *software*, a função “*readtable*” atendia a necessidade de importação de uma base para o programa.

Após utilizar a função, o programa pode armazenar as informações vindas da tabela para buscar dentro do arquivo o composto orgânico desejado pelo usuário e por fim realizar os cálculos.

4.3 App Designer

Na etapa de elaboração do algoritmo de cálculo o programa foi criado utilizando um aplicativo dentro do MATLAB®, o MATLAB App Designer®. O App Designer é uma ferramenta dentro do MATLAB® que possibilita a criação de softwares sem a necessidade de ser um profissional em desenvolvimento de softwares, através da montagem visual do programa e a utilização de funções integradas a esse visual. A figura 6 exemplifica a tela inicial da ferramenta.

Figura 6 - Tela inicial do MATLAB App Designer



Fonte: Os autores (2022)

Através da guia “*component library*”, na aba de *design view*, foi desenvolvida a tela inicial do programa com os campos necessários para inserção de temperatura e seleção do composto, bem como os botões necessários para execução das interações requisitadas pelo usuário. A figura 7 mostra a interface inicial desenvolvida para a interação com o usuário.

Figura 7 - Tela inicial do programa

Programa para cálculo de variação da entalpia - Compostos Orgânicos

Temperatura Inicial 1 (K)	0	Temperatura Final 1 (K)	0	$\Delta H1$	0.000	J/g.mol
Temperatura Inicial 2 (K)	0	Temperatura Final 2 (K)	0	$\Delta H2$	0.000	J/g.mol
Temperatura Inicial 3 (K)	0	Temperatura Final 3 (K)	0	$\Delta H3$	0.000	J/g.mol

Observação: A pressão do processo deve ser constante e as temperaturas máximas e mínimas respeitadas para que os cálculos obtidos sejam verdadeiros

Fórmula	Nome Inglês	Composto	A	B	C	D	E	T mínima	T máxima

Composto

BROMOCLORODIFLUOROMETANO

▼

Selecionar este composto e calcular ΔH

Mostrar toda tabela

Fonte: YAWS, 1999

Fonte: Os autores (2022)

Para os elementos visuais inseridos, são relacionadas funções chamadas de “callbacks” que proporcionam as interações assim que o usuário clica no elemento visual com a respectiva função. A figura 8 mostra um exemplo dessa função.

Figura 8 - Funções "callbacks"

```
% Callbacks that handle component events
methods (Access = private)

% Button pushed function: MostrartodatabelaButton
function MostrartodatabelaButtonPushed(app, event)
    % Botão que ao ser pressionado mostra toda base de dados na
    % tela do usuário
    tabela = readtable("BasededadosTCC.xlsx", 'Sheet', 1);
    app.Tabela.Data = tabela;
end
```

Fonte: Os autores (2022)

4.4 Uso do programa

Após o início do programa o usuário tem algumas opções para interação: Mostrar toda tabela, inserir diferentes temperaturas, selecionar os compostos através de uma lista suspensa e realizar o cálculo da variação de entalpia. Ao clicar no botão

“Mostrar toda tabela”, o usuário visualiza todos os valores da tabela, tendo opção de percorrer todos os valores. A figura 9 mostra essa função.

Figura 9 - Mostrar toda tabela
Programa para cálculo de variação da entalpia - Compostos Orgânicos

Temperatura Inicial 1 (K) Temperatura Final 1 (K) $\Delta H1$ J/g.mol

Temperatura Inicial 2 (K) Temperatura Final 2 (K) $\Delta H2$ J/g.mol

Temperatura Inicial 3 (K) Temperatura Final 3 (K) $\Delta H3$ J/g.mol

Observação: A pressão do processo deve ser constante e as temperaturas máximas e mínimas respeitadas para que os cálculos obtidos sejam verdadeiros

Fórmula	Nome Inglês	Composto	A	B	C	D	E	
CBrClF2	BROMOCHLORODIFLUOROMETHANE	BROMOCLORODIFLUOROMETANO	18.3870	0.2793	-3.7127e-04	2.2889e-07	-5.322	▲
CBrCl3	BROMOTRICHLOROMETHANE	BROMOTRICLOROMETANO	24.4840	0.3202	4.9096e-04	3.3359e-07	-8.298	
CBrF3	BROMOTRIFLUOROMETHANE	BROMOTRIFLUOROMETANO	17.2080	0.2477	-2.9181e-04	1.6247e-07	-3.476	
CBr2F2	DIBROMODIFLUOROMETHANE	DIBROMODIFLUOROMETANO	22.3990	0.2740	-3.7433e-04	2.3638e-07	-5.606	
CClF3	CHLOROTRIFLUOROMETHANE	CLOROTRIFLUOROMETANO	13.7620	0.2495	-2.8194e-04	1.4962e-07	-3.045	
CClN	CYANOGEN CHLORIDE	CLORETO DE CIANOGENIO	21.2700	0.1192	-1.6822e-04	1.1457e-07	-2.921	
CCl2F2	DICHLORODIFLUOROMETHANE	DICLORODIFLUOROMETANO	14.8770	0.2829	-3.6295e-04	2.1591e-07	-4.861	
CCl2O	PHOSGENE	FOSGÊNIO	20.7470	0.1797	-2.3242e-04	1.4224e-07	-3.308	▼

Composto Selecionar este composto e calcular ΔH **Mostrar toda tabela** Fonte: YAWS, 1999

Fonte: Os autores (2022)

Para realizar o cálculo da entalpia o usuário deve inserir a temperatura inicial e final, tendo a opção de escolher 3 intervalos de temperatura diferentes para fins de comparação com o mesmo composto, sempre respeitando os limites definidos de acordo com a tabela. Após a inserção escolhe-se o composto de interesse para o cálculo utilizando a lista suspensa, conforme ilustrado na figura 10.

Figura 10 - Inserção de temperaturas e seleção do composto

Programa para cálculo de variação da entalpia - Compostos Orgânicos

Temperatura Inicial 1 (K) Temperatura Final 1 (K) $\Delta H1$ J/g.mol
 Temperatura Inicial 2 (K) Temperatura Final 2 (K) $\Delta H2$ J/g.mol
 Temperatura Inicial 3 (K) Temperatura Final 3 (K) $\Delta H3$ J/g.mol

Observação: A pressão do processo deve ser constante e as temperaturas máximas e mínimas respeitadas para que os cálculos obtidos sejam verdadeiros

Fórmula	Nome Inglês	Composto	A	B	C	D	E	T mínima	T máxima

Composto

 Fonte: YAWS, 1999

Fonte: Os autores (2022)

Após selecionar o composto, o usuário deve clicar em “Selecionar este composto e calcular ΔH ”. O resultado então será mostrado em J/(g.mol), a figura 11 exemplifica a tela obtida.

Figura 11 - Resultado do cálculo para o usuário

Programa para cálculo de variação da entalpia - Compostos Orgânicos

Temperatura Inicial 1 (K) Temperatura Final 1 (K) $\Delta H1$ J/g.mol
 Temperatura Inicial 2 (K) Temperatura Final 2 (K) $\Delta H2$ J/g.mol
 Temperatura Inicial 3 (K) Temperatura Final 3 (K) $\Delta H3$ J/g.mol

Observação: A pressão do processo deve ser constante e as temperaturas máximas e mínimas respeitadas para que os cálculos obtidos sejam verdadeiros

Fórmula	Nome Inglês	Composto	A	B	C	D	E	T mínima	T máxima
C2H4	ETHYLENE	ETILENO	32.0830	-0.0148	2.4800e-04	-2.3700e-07	6.8300e-11	60	1500

Composto

 Fonte: YAWS, 1999

Fonte: Os autores (2022)

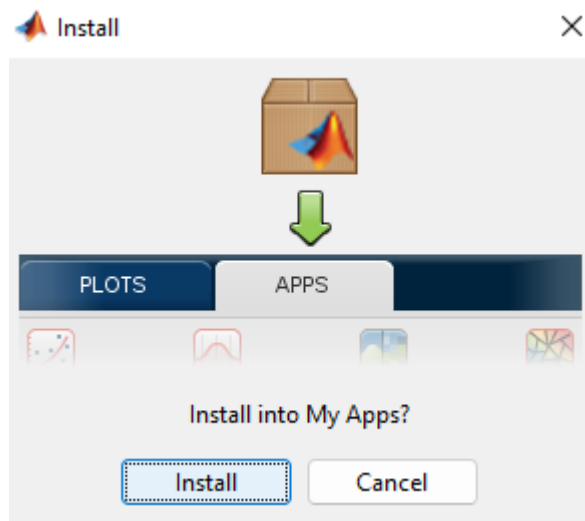
Para realização de mais cálculos o usuário pode selecionar outros compostos e definir outras temperaturas e repetir as operações.

4.5 Distribuição

Para utilização pelo usuário, o programa será disponibilizado como um aplicativo que pode ser instalado dentro do MATLAB®. O programa é compilado utilizando a função de compartilhamento MATLAB® App.

Esta função seleciona todos os itens necessários, incluindo anexos e demais arquivos, para a execução do programa e compila em um arquivo executável. Ao clicar no arquivo o usuário, com MATLAB® previamente instalado, recebe a informação para instalar o aplicativo. A figura 12 mostra a tela que será exibida ao usuário nessa etapa.

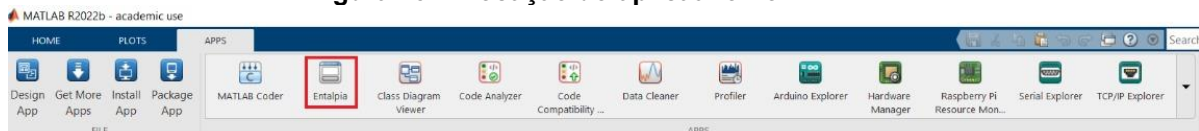
Figura 12 - Tela para instalação



Fonte: Os autores (2022)

Após a instalação o aplicativo fica alocado na aba “Apps” do MATLAB®, e disponível para uso sempre que necessário, conforme ilustrado na figura 13.

Figura 13 - Alocação do aplicativo no MATLAB



Fonte: Os autores (2022)

5 CONCLUSÃO

Buscar dados precisos e de forma rápida para facilitar a rotina é um desafio para estudantes e colaboradores de muitas empresas. Pensando na evolução tecnológica e no compartilhamento rápido de informações, nota-se a presença cada vez maior de ferramentas para automatizar tarefas, como o uso de calculadoras, que são programadas para receber inúmeros dados de entrada de acordo com um valor de desejo do usuário, e as máquinas dão uma resposta de acordo com esses valores de entrada.

Com isso, foi desenvolvido o programa semelhante a uma calculadora em MATLAB® para incentivar o uso de softwares para estudantes e pesquisadores que buscam dados para compostos orgânicos, mais especificamente o valor da variação da entalpia destes compostos para processos em pressão constante em um dado intervalo de temperatura.

Conforme já citado, a variação da entalpia tem aplicações em balanços de energia que envolvem processos de várias áreas de atuação do profissional de Engenharia Química, tornando essa uma informação valiosa para assuntos relacionados a processos químicos.

Por fim, avaliando o tempo de resposta do programa de cálculo de entalpia com a base de dados inserida nota-se um resultado satisfatório, com interface simples e intuitiva, desenvolvida por botões automáticos para o cálculo de variação de entalpia de compostos orgânicos.

5.1 Sugestões de Melhoria

Devido ao caráter tecnológico do trabalho, a atualização e melhorias para a contínua e confiável distribuição é de extrema importância. Como trabalho para o futuro e sugestões de melhoria, ressalta-se a importância de manter a base de dados atualizada para possibilitar a disponibilização para mais universidades com acesso a ferramenta MATLAB®.

Outro adicional que não foi possível realizar seria a mensagem de erro automática mostrada ao usuário, caso a temperatura escolhida não fosse compatível com as máximas e mínimas apontadas pela tabela, pois assim seria garantido que o usuário sempre teria um resultado verdadeiro.

Para promover melhores comparativos, pode ser implementado a opção de analisar a variação da entalpia em um mesmo intervalo de temperatura para compostos diferentes.

REFERÊNCIAS

- ATKINS, Peter e Julio de Paula. **Físico-Química** - Vol. 1, 10ª edição. Disponível em: Minha Biblioteca, Grupo GEN, 2017.
- BORGNAKKE, Claus; SONNTAG, Richard E.. **Fundamentos da Termodinâmica**. 8. ed. São Paulo: Editora Edgard Blucher Ltda., 2013.
- ÇENGEL, Yunus A.; BOLES, Michael A.. **Termodinâmica**. 7. ed. Porto Alegre: Amgh Editora Ltda., 2013.
- ÇENGEL, Yunus A.; GHAJAR, Afshin J. **Transferência de calor e massa: uma abordagem prática**. Grupo A, 2009.
- COELHO, João Carlos Martins. **Energia e Fluidos**: volume 1 - termodinâmica. São Paulo: Editora Edgard Blucher Ltda., 2016.
- CREMASCO, Marco Aurélio. **Vale a pena estudar Engenharia Química**. 3. ed. São Paulo: Edgar Blucher Ltda, 2015.
- FONSECA, Isabel M. Almeida; EGAS, Ana Paula. **Fundamentos de Balanço de Energia**. Coimbra: Imprensa da Universidade de Coimbra, 2009. Disponível em: <https://ucdigitalis.uc.pt/pombalina/item/52181>. Acesso em: 28 abr. 2022.
- GERHARDT, Tatiana E.; SILVEIRA, Denise T. **Métodos de pesquisa**. 1 ed. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2009.
- GIL, Antonio C. **Como Elaborar Projetos de Pesquisa**. Grupo GEN, 7. ed. 2022.
- GILAT, amos. **Matlab com aplicações em engenharia**. Disponível em: minha biblioteca, (4ª edição). Grupo a, 2012.
- KORETSKY, Milo D.. **Termodinâmica para engenharia química**. Rio de Janeiro: Ltc, 2007. Tradução: Márcio José Estillac de Mello Cardoso, Oswaldo Esteves Barcia, Rosana Janot Martins.
- MATSUMOTO, Élia Yathie. **Matlab R2013a - Teoria e Programação**: guia prático. São Paulo: Editora Érica, 2013.
- PALM, William J.. **Introdução ao MATLAB para Engenheiros**. 3. ed. Porto Alegre: Amgh Editora Ltda., 2013. Tradução: Tales Argolo Jesus.
- SMITH, J. M. *et al.* **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 8. ed. Rio de Janeiro: Grupo Editora Nacional, 2020.
- THE MATHWORKS INC (org.). **MATLAB**. Disponível em: <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>. Acesso em: 30 maio 2022.
- UTGIKAR, Vivek. **Introdução a Engenharia Química**: conceitos, aplicações e prática computacional. Rio de Janeiro: Grupo Editora Nacional, 2019. Tradução: Verônica Calado, Neuman Solange de Resende.

YAWS, Carl L.. **Chemical properties handbook**: physical, thermodynamic, environmental, transport, safety, and health related properties for organic and inorganic chemicals. Nova York: McGraw-Hill, 1999.

APÊNDICE 1 - Chemical properties handbook - Heat Capacity of gas – organic compounds (YAWS, 1999)

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS

			$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$					(C _p - joule/(mol K), T - K)	
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
1	CBrClF ₂	BROMOCHLORODIFLUOROMETHANE	18.387	2.7933E-01	-3.7127E-04	2.2889E-07	-5.3229E-11	100	1500
2	CBrCl ₃	BROMOTRICHLOROMETHANE	24.484	3.2024E-01	-4.9096E-04	3.3359E-07	-8.2982E-11	100	1500
3	CBrF ₃	BROMOTRIFLUOROMETHANE	17.208	2.4770E-01	-2.9181E-04	1.6247E-07	-3.4765E-11	100	1500
4	CBr ₂ F ₂	DIBROMODIFLUOROMETHANE	22.399	2.7403E-01	-3.7433E-04	2.3638E-07	-5.6067E-11	100	1500
5	CClF ₃	CHLOROTRIFLUOROMETHANE	13.762	2.4951E-01	-2.8194E-04	1.4962E-07	-3.0450E-11	100	1500
6	CClN	CYANOGEN CHLORIDE	21.270	1.1915E-01	-1.6822E-04	1.1457E-07	-2.9210E-11	100	1500
7	CCl ₂ F ₂	DICHLORODIFLUOROMETHANE	14.877	2.8292E-01	-3.6295E-04	2.1591E-07	-4.8619E-11	100	1500
8	CCl ₂ O	PHOSGENE	20.747	1.7972E-01	-2.3242E-04	1.4224E-07	-3.3087E-11	100	1500
9	CCl ₃ F	TRICHLOROFLUOROMETHANE	16.636	3.1336E-01	-4.4426E-04	2.8612E-07	-6.8556E-11	89	1500
10	CCl ₄	CARBON TETRACHLORIDE	19.816	3.3311E-01	-5.0511E-04	3.4057E-07	-8.4249E-11	100	1500
11	CF ₂ O	CARBONYL FLUORIDE	23.640	8.9853E-02	-2.4575E-05	-2.8140E-08	1.4023E-11	100	1500
12	CF ₄	CARBON TETRAFLUORIDE	15.278	1.9916E-01	-1.6369E-04	5.1686E-08	-3.1820E-12	100	1500
13	CHBr ₃	TRIBROMOMETHANE	33.356	1.7475E-01	-1.9516E-04	1.0725E-07	-2.3180E-11	100	1500
14	CHClF ₂	CHLORODIFLUOROMETHANE	20.519	1.4746E-01	-9.2440E-05	1.4379E-08	3.4356E-12	100	1500
15	CHCl ₂ F	DICHLOROFLUOROMETHANE	33.078	1.0473E-01	-2.2510E-05	-3.8822E-08	1.8245E-11	100	1500
16	CHCl ₃	CHLOROFORM	22.487	1.9823E-01	-2.1676E-04	1.1636E-07	-2.4555E-11	100	1500
17	CHF ₃	TRIFLUOROMETHANE	23.287	9.5385E-02	2.0049E-05	-7.4432E-08	2.7428E-11	100	1500
18	CHI ₃	TRIIODOMETHANE	41.552	1.5326E-01	-1.5543E-04	5.8354E-08	-----	298	1000
19	CHN	HYDROGEN CYANIDE	25.766	3.7969E-02	-1.2416E-05	-3.2240E-09	2.2610E-12	100	1500
20	CHNS	ISOTHIOCYANIC-ACID	14.770	1.4484E-01	-1.4613E-04	5.5948E-08	-----	298	1000
21	CH ₂ BrCl	BROMOCHLOROMETHANE	27.752	9.1021E-02	-8.2541E-06	-3.7449E-08	1.5156E-11	100	1500
22	CH ₂ Br ₂	DIBROMOMETHANE	28.305	1.0581E-01	-4.7966E-05	-2.6711E-09	5.1497E-12	100	1500
23	CH ₂ ClF	CHLOROFLUOROMETHANE	12.674	1.3973E-01	-8.8709E-05	2.1577E-08	-----	298	1000
24	CH ₂ Cl ₂	DICHLOROMETHANE	26.694	8.3984E-02	8.9712E-06	-5.0924E-08	1.8726E-11	100	1500
25	CH ₂ F ₂	DIFLUOROMETHANE	30.323	1.1176E-02	1.5809E-04	-1.6323E-07	4.7955E-11	100	1500
26	CH ₂ I ₂	DIIODOMETHANE	28.918	1.1739E-01	-7.3808E-05	1.7055E-08	1.2051E-14	100	1500
27	CH ₂ O	FORMALDEHYDE	34.428	-2.9779E-02	1.5104E-04	-1.2733E-07	3.3887E-11	50	1500
28	CH ₂ O ₂	FORMIC ACID	31.745	7.4234E-03	1.8791E-04	-1.9475E-07	5.7613E-11	50	1500
29	CH ₃ Br	METHYL BROMIDE	29.146	2.4374E-02	1.0655E-04	-1.1324E-07	3.3241E-11	100	1500
30	CH ₃ Cl	METHYL CHLORIDE	27.385	2.6036E-02	1.0320E-04	-1.0887E-07	3.1642E-11	150	1500
31	CH ₃ Cl ₃ Si	METHYL TRICHLOROSILANE	56.670	2.0066E-01	-1.6721E-04	7.2533E-08	-1.2684E-11	200	1500
32	CH ₃ F	METHYL FLUORIDE	34.077	-3.5019E-02	2.2031E-04	-1.9566E-07	5.4104E-11	100	1500
33	CH ₃ I	METHYL IODIDE	25.635	6.6836E-02	1.2292E-05	-3.6742E-08	1.2301E-11	100	1500
34	CH ₃ NO	FORMAMIDE	30.911	1.4363E-02	1.9281E-04	-1.9805E-07	5.8262E-11	150	1500
35	CH ₃ NO ₂	NITROMETHANE	41.136	3.4367E-03	2.6380E-04	-2.6898E-07	7.9503E-11	100	1500
36	CH ₃ NO ₂	METHYL-NITRITE	12.593	2.0137E-01	-1.1296E-04	2.2463E-08	-----	298	1000
37	CH ₃ NO ₃	METHYL-NITRATE	17.049	2.4073E-01	-1.4966E-04	3.4904E-08	-----	298	1000
38	CH ₄	METHANE	34.942	-3.9957E-02	1.9184E-04	-1.5303E-07	3.9321E-11	50	1500
39	CH ₄ Cl ₂ Si	METHYL DICHLOROSILANE	37.250	2.3327E-01	-1.9952E-04	9.1473E-08	-1.7387E-11	200	1500
40	CH ₄ O	METHANOL	40.046	-3.8287E-02	2.4529E-04	-2.1679E-07	5.9909E-11	100	1500
41	CH ₄ O ₃ S	METHANESULFONIC ACID	65.450	-1.0363E-01	6.2784E-04	-6.7194E-07	2.3114E-10	298	1000
42	CH ₄ S	METHYL MERCAPTAN	40.307	-3.6753E-03	1.8400E-04	-1.7596E-07	5.0137E-11	100	1500
43	CH ₅ ClSi	METHYL CHLOROSILANE	25.886	2.1064E-01	-1.3055E-04	3.6499E-08	-3.0118E-12	200	1500
44	CH ₅ N	METHYLAMINE	40.039	-1.5108E-02	2.5012E-04	-2.3336E-07	6.5582E-11	100	1500
45	CH ₆ Si	METHYL SILANE	25.277	1.2988E-01	5.9803E-05	-1.2080E-07	4.0036E-11	100	1500
46	CN ₄ O ₈	TETRANITROMETHANE	23.733	5.5312E-01	-4.5854E-04	1.5286E-07	-1.3967E-11	298	1500
47	CO	CARBON MONOXIDE	29.556	-6.5807E-03	2.0130E-05	-1.2227E-08	2.2617E-12	60	1500
48	COS	CARBONYL SULFIDE	20.913	9.2794E-02	-9.7014E-05	5.0943E-08	-1.0615E-11	100	1500
49	CO ₂	CARBON DIOXIDE	27.437	4.2315E-02	-1.9555E-05	3.9968E-09	-2.9872E-13	50	5000
50	CS ₂	CARBON DISULFIDE	20.461	1.2299E-01	-1.6184E-04	1.0199E-07	-2.4444E-11	100	1500
51	C ₂ BrF ₃	BROMOTRIFLUOROETHYLENE	33.956	2.3803E-01	-2.5448E-04	1.3108E-07	-2.6462E-11	300	1200
52	C ₂ Br ₂ F ₄	1,2-DIBROMOTETRAFLUOROETHANE	50.542	3.7777E-01	-4.8770E-04	3.1054E-07	-7.8174E-11	298	1200
53	C ₂ ClF ₃	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	28.388	2.5871E-01	-2.9010E-04	1.5876E-07	-3.3880E-11	300	1500
54	C ₂ ClF ₅	CHLOROPENTAFLUOROETHANE	24.663	3.8598E-01	-3.8927E-04	1.7751E-07	-2.9992E-11	200	1500
55	C ₂ Cl ₂ F ₄	1,2-DICHLOROTETRAFLUOROETHANE	17.183	4.8507E-01	-5.9368E-04	3.3494E-07	-7.1705E-11	273	1500
56	C ₂ Cl ₃ F ₃	1,1,2-TRICHLOROTRIFLUOROETHANE	42.456	4.0973E-01	-5.0045E-04	2.8463E-07	-6.1623E-11	200	1500
57	C ₂ Cl ₄	TETRACHLOROETHYLENE	34.627	3.1065E-01	-4.5258E-04	3.2734E-07	-9.4234E-11	298	1000
58	C ₂ Cl ₄ F ₂	1,1,2,2-TETRACHLORODIFLUOROETHANE	3.788	6.9339E-01	-1.0927E-03	7.6080E-07	-1.9434E-10	298	1000
59	C ₂ Cl ₄ O	TRICHLOROACETYL CHLORIDE	55.547	2.5821E-01	-2.9449E-04	1.6054E-07	-3.3869E-11	298	1500
60	C ₂ Cl ₆	HEXACHLOROETHANE	48.475	4.4117E-01	-5.9638E-04	3.6922E-07	-8.5631E-11	100	1500
61	C ₂ F ₄	TETRAFLUOROETHYLENE	30.934	2.1587E-01	-1.9110E-04	7.5713E-08	-1.0493E-11	150	1500
62	C ₂ F ₆	HEXAFLUOROETHANE	13.604	4.3503E-01	-4.8166E-04	2.4841E-07	-4.8897E-11	100	1500
63	C ₂ HBrClF ₃	HALOTHANE	65.307	1.2411E-01	8.8736E-05	-1.7716E-07	6.3268E-11	100	1500
64	C ₂ HClF ₂	2-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	19.530	2.4576E-01	-2.5701E-04	1.3429E-07	-2.7612E-11	298	1500
65	C ₂ HCl ₃	TRICHLOROETHYLENE	40.879	1.6218E-01	-1.0399E-04	1.3310E-08	5.9103E-12	100	1500
66	C ₂ HCl ₃ O	DICHLOROACETYL CHLORIDE	38.143	2.3343E-01	-1.9070E-04	5.6320E-08	-2.5489E-12	298	1500
67	C ₂ HCl ₃ O	TRICHLOROACETALDEHYDE	46.176	2.3126E-01	-2.3659E-04	1.2539E-07	-2.7197E-11	298	1200
68	C ₂ HCl ₅	PENTACHLOROETHANE	28.297	4.3657E-01	-5.5684E-04	3.3877E-07	-7.8834E-11	100	1500
69	C ₂ HF ₃	TRIFLUOROETHENE	16.298	2.3109E-01	-1.9825E-04	6.4911E-08	-----	298	1000
70	C ₂ HF ₃ O ₂	TRIFLUOROACETIC ACID	9.274	3.9410E-01	-4.3755E-04	2.4769E-07	-5.7309E-11	298	1200
71	C ₂ HF ₅	PENTAFLUOROETHANE	40.370	2.0895E-01	-4.5524E-05	-8.2827E-08	3.9062E-11	100	1500
72	C ₂ H ₂	ACETYLENE	19.360	1.1519E-01	-1.2374E-04	7.2370E-08	-1.6590E-11	200	1500
73	C ₂ H ₂ Br ₄	1,1,2,2-TETRABROMOETHANE	49.111	2.5471E-01	-2.1340E-04	7.7534E-08	-9.0356E-12	150	1500
74	C ₂ H ₂ Cl ₂	1,1-DICHLOROETHYLENE	21.272	2.0394E-01	-1.8292E-04	8.2561E-08	-1.4802E-11	200	1500
75	C ₂ H ₂ Cl ₂	cis-1,2-DICHLOROETHYLENE	11.376	2.4489E-01	-2.5183E-04	1.3368E-07	-2.8416E-11	200	1500
76	C ₂ H ₂ Cl ₂	trans-1,2-DICHLOROETHYLENE	19.666	2.0908E-01	-1.9503E-04	9.4941E-08	-1.8848E-11	200	1500
77	C ₂ H ₂ Cl ₂ O	CHLOROACETYL CHLORIDE	29.566	2.1377E-01	-1.8076E-04	7.9913E-08	-1.4782E-11	298	1500
78	C ₂ H ₂ Cl ₂ O	DICHLOROACETALDEHYDE	39.761	1.3843E-01	9.8425E-06	-1.0396E-07	4.4962E-11	298	1200

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
79	C2H2Cl2O2	DICHLOROACETIC ACID	48.334	1.7165E-01	-6.2134E-05	-3.6029E-08	2.3198E-11	298 1200
80	C2H2Cl3F	1,1,1-TRICHLOROFLUOROETHANE	20.183	3.8754E-01	-4.6141E-04	2.7663E-07	-6.5842E-11	298 1200
81	C2H2Cl4	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	27.227	3.4932E-01	-3.7793E-04	2.0496E-07	-4.3937E-11	200 1500
82	C2H2Cl4	1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE	20.427	3.6839E-01	-4.0365E-04	2.2067E-07	-4.7303E-11	298 1500
83	C2H2F2	1,1-DIFLUOROETHYLENE	24.354	1.2196E-01	1.1084E-05	-7.9704E-08	3.0820E-11	100 1500
84	C2H2F2	cis-1,2-DIFLUOROETHENE	7.250	2.1736E-01	-1.6905E-04	5.1484E-08	-----	298 1000
85	C2H2F2	trans-1,2-DIFLUOROETHENE	12.402	2.0202E-01	-1.5191E-04	4.4890E-08	-----	298 1000
86	C2H2F4	1,1,1,2-TETRAFLUOROETHANE	8.429	3.4966E-01	-3.3281E-04	1.5603E-07	-2.8939E-11	200 1500
87	C2H2O	KETENE	-14.704	3.1238E-01	-4.3385E-04	2.9499E-07	-7.5221E-11	200 1500
88	C2H2O4	OXALIC ACID	-5.565	1.3496E-01	1.3737E-05	-1.9105E-07	1.1311E-10	298 1000
89	C2H3Br	VINYL BROMIDE	19.032	1.4697E-01	-7.2736E-05	4.7354E-09	4.4305E-12	200 1500
90	C2H3Cl	VINYL CHLORIDE	17.193	1.4564E-01	-6.4281E-05	-3.2385E-09	6.7882E-12	200 1500
91	C2H3ClF2	1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHANE	20.964	2.6700E-01	-2.0774E-04	7.5759E-08	-9.7753E-12	200 1500
92	C2H3ClO	ACETYL CHLORIDE	37.484	1.0683E-01	1.3035E-05	-5.7327E-08	1.9960E-11	200 1500
93	C2H3ClO	CHLOROACETALDEHYDE	25.272	1.5004E-01	-3.4110E-05	-4.1182E-08	2.0993E-11	298 1200
94	C2H3ClO2	CHLOROACETIC ACID	9.327	2.9997E-01	-2.6947E-04	1.2616E-07	-2.4406E-11	298 1500
95	C2H3ClO2	METHYL CHLOROFORMATE	13.353	2.7827E-01	-2.0298E-04	3.2225E-08	1.9750E-11	298 900
96	C2H3Cl3	1,1,1-TRICHLOROETHANE	18.674	3.3443E-01	-3.4963E-04	1.8764E-07	-4.0744E-11	100 1500
97	C2H3Cl3	1,1,2-TRICHLOROETHANE	28.881	2.4893E-01	-1.7639E-04	5.2632E-08	-3.5668E-12	200 1500
98	C2H3F	VINYL FLUORIDE	27.617	5.4052E-02	1.3093E-04	-1.6220E-07	5.0829E-11	100 1500
99	C2H3F3	1,1,1-TRIFLUOROETHANE	33.444	1.5361E-01	3.3402E-05	-1.1974E-07	4.4424E-11	100 1500
100	C2H3N	ACETONITRILE	36.947	2.2085E-02	1.4661E-04	-1.5012E-07	4.3482E-11	100 1500
101	C2H3NO	METHYL ISOCYANATE	21.328	8.5385E-02	7.8504E-05	-1.0050E-07	2.9508E-11	298 1500
102	C2H4	ETHYLENE	32.083	-1.4831E-02	2.4774E-04	-2.3766E-07	6.8274E-11	60 1500
103	C2H4Br2	1,1-DIBROMOETHANE	21.084	2.5090E-01	-2.0060E-04	8.4960E-08	-1.5026E-11	200 1500
104	C2H4Br2	1,2-DIBROMOETHANE	47.739	1.3553E-01	1.0414E-05	-6.8462E-08	2.5192E-11	200 1500
105	C2H4Cl2	1,1-DICHLOROETHANE	15.730	2.6124E-01	-2.1489E-04	9.5761E-08	-1.8004E-11	200 1500
106	C2H4Cl2	1,2-DICHLOROETHANE	37.275	1.4362E-01	1.0378E-05	-7.8305E-08	2.8872E-11	200 1500
107	C2H4Cl2O	BIS(CHLOROMETHYL)ETHER	3.763	3.6729E-01	-3.5749E-04	1.8325E-07	-3.7910E-11	298 1500
108	C2H4F2	1,1-DIFLUOROETHANE	36.271	7.8276E-02	1.6310E-04	-2.0396E-07	6.3814E-11	100 1500
109	C2H4F2	1,2-DIFLUOROETHANE	18.309	2.0288E-01	-6.1613E-05	-3.8781E-08	2.0688E-11	200 1500
110	C2H4I2	1,2-DIODOETHANE	25.893	2.3491E-01	-1.6837E-04	4.9162E-08	-----	298 1000
111	C2H4O	ACETALDEHYDE	34.140	4.0020E-02	1.5634E-04	-1.6445E-07	4.7248E-11	100 1500
112	C2H4O	ETHYLENE OXIDE	30.827	-7.6041E-03	3.2347E-04	-3.2747E-07	9.7271E-11	50 1500
113	C2H4OS	THIOACETIC-ACID	38.465	1.6308E-01	-7.0053E-05	4.8020E-09	-----	298 1000
114	C2H4O2	ACETIC ACID	34.850	3.7626E-02	2.8311E-04	-3.0767E-07	9.2646E-11	50 1500
115	C2H4O2	METHYL FORMATE	5.795	2.5072E-01	-1.7515E-04	6.0565E-08	-8.1015E-12	250 1500
116	C2H4S	THIACYCLOPROPANE	-11.920	2.7834E-01	-2.1566E-04	6.7312E-08	-----	298 1000
117	C2H5Br	BROMOETHANE	26.552	1.1837E-01	6.7525E-05	-1.1655E-07	3.7186E-11	100 1500
118	C2H5Cl	ETHYL CHLORIDE	35.946	5.2294E-02	2.0321E-04	-2.2795E-07	6.9123E-11	100 1500
119	C2H5ClO	2-CHLOROETHANOL	12.997	2.5587E-01	-1.6553E-04	5.2292E-08	-6.5812E-12	298 1500
120	C2H5F	ETHYL FLUORIDE	21.452	1.2080E-01	7.8409E-05	-1.2578E-07	3.9184E-11	150 1500
121	C2H5I	ETHYL IODIDE	27.759	1.1915E-01	5.9726E-05	-1.0756E-07	3.4157E-11	100 1500
122	C2H5N	ETHYLENIMINE	12.316	1.1833E-01	1.2598E-04	-1.8322E-07	5.8831E-11	150 1500
123	C2H5NO	ACETAMIDE	17.748	1.3627E-01	1.0668E-04	-1.8647E-07	6.2842E-11	100 1500
124	C2H5NO	N-METHYLFORMAMIDE	43.449	-1.0054E-01	7.2412E-04	-8.6224E-07	3.2724E-10	298 1000
125	C2H5NO2	NITROETHANE	17.726	2.2334E-01	-2.1690E-05	-8.0889E-08	3.2223E-11	200 1500
126	C2H5NO3	ETHYL-NITRATE	3.530	3.8951E-01	-2.7423E-04	7.6538E-08	-----	298 1000
127	C2H6	ETHANE	28.146	4.3447E-02	1.8946E-04	-1.9082E-07	5.3349E-11	100 1500
128	C2H6AlCl	DIMETHYALUMINUM CHLORIDE	13.870	3.1526E-01	-2.4008E-04	9.9159E-08	-1.7228E-11	298 1500
129	C2H6O	DIMETHYL ETHER	34.668	7.0293E-02	1.6530E-04	-1.7675E-07	4.9313E-11	100 1500
130	C2H6O	ETHANOL	27.091	1.1055E-01	1.0957E-04	-1.5046E-07	4.6601E-11	100 1500
131	C2H6OS	DIMETHYL SULFOXIDE	27.816	2.4839E-01	-1.3176E-04	2.3843E-08	1.6501E-12	200 1500
132	C2H6O2	ETHYLENE GLYCOL	48.218	1.9073E-01	-6.6117E-05	-1.8834E-08	1.2555E-11	200 1500
133	C2H6O4S	DIMETHYL SULFATE	23.800	3.7920E-01	-2.0385E-04	2.4893E-08	8.1594E-12	200 1500
134	C2H6S	DIMETHYL SULFIDE	35.994	1.2381E-01	5.0871E-05	-9.1708E-08	2.8274E-11	200 1500
135	C2H6S	ETHYL MERCAPTAN	47.034	4.1940E-02	2.3486E-04	-2.5035E-07	7.4049E-11	100 1500
136	C2H6S2	DIMETHYL DISULFIDE	50.010	1.4793E-01	4.2325E-05	-9.9087E-08	3.2173E-11	200 1500
137	C2H7N	DIMETHYLAMINE	30.638	1.0737E-01	1.5824E-04	-1.9418E-07	5.8509E-11	200 1500
138	C2H7N	ETHYLAMINE	30.983	1.2458E-01	1.0966E-04	-1.5256E-07	4.6640E-11	200 1500
139	C2H7NO	MONOETHANOLAMINE	-0.555	3.7003E-01	-3.1976E-04	1.5834E-07	-3.2344E-11	298 1500
140	C2H8N2	ETHYLENEDIAMINE	10.429	3.2490E-01	-1.9912E-04	6.3557E-08	-8.7124E-12	298 1500
141	C2H8Si	DIMETHYL SILANE	27.940	2.2419E-01	-4.0022E-06	-9.9567E-08	3.6936E-11	100 1500
142	C2N2	CYANOGEN	22.445	1.6837E-01	-2.3212E-04	1.5784E-07	-4.0479E-11	100 1500
143	C3F6	HEXAFLUOROPROPYLENE	-3.108	5.2270E-01	-4.6521E-04	1.9228E-07	-2.9928E-11	200 1500
144	C3F6O	HEXAFLUOROACETONE	0.451	5.2201E-01	-4.5370E-04	1.6725E-07	-1.9476E-11	200 1500
145	C3F8	OCTAFLUOROPROPANE	14.695	6.1745E-01	-6.7174E-04	3.4675E-07	-6.9257E-11	273 1500
146	C3H2N2	MALONONITRILE	27.389	1.6397E-01	-3.8642E-05	-5.4165E-08	2.7216E-11	298 1200
147	C3H3Cl	PROPARGYL CHLORIDE	20.366	2.2487E-01	-1.9722E-04	9.5424E-08	-1.9480E-11	298 1500
148	C3H3N	ACRYLONITRILE	18.425	1.8336E-01	-1.0072E-04	1.8747E-08	9.1114E-13	200 1500
149	C3H3NO	OXAZOLE	25.962	5.5802E-02	3.1816E-04	-3.7323E-07	1.1787E-10	50 1500
150	C3H4	METHYLACETYLENE	27.565	1.2037E-01	-6.0666E-06	-4.0713E-08	1.5078E-11	200 1500
151	C3H4	PROPADIENE	28.504	8.1576E-02	1.0896E-04	-1.4641E-07	4.5759E-11	50 1500
152	C3H4Cl2	2,3-DICHLOROPROPENE	29.854	2.6319E-01	-2.1492E-04	9.6796E-08	-1.8613E-11	298 1200
153	C3H4O	ACROLEIN	109.243	-5.0952E-01	1.7059E-03	-1.8068E-06	6.5983E-10	298 1000
154	C3H4O	PROPARGYL ALCOHOL	20.577	2.0827E-01	-1.1794E-04	2.3926E-08	1.9047E-13	298 1500
155	C3H4O2	ACRYLIC ACID	7.755	2.9386E-01	-2.0878E-04	7.1591E-08	-9.0960E-12	250 1500
156	C3H4O2	BETA-PROPIOLACTONE	9.108	2.3694E-01	-5.7117E-05	-5.5709E-08	2.6215E-11	200 1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $(C_p - \text{joule/(mol K), } T - \text{K})$									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
157	C3H4O2	VINYL FORMATE	-19.250	4.1753E-01	-4.2109E-04	2.2583E-07	-4.7796E-11	298	1500
158	C3H4O3	ETHYLENE CARBONATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
159	C3H4O3	PYRUVIC ACID	5.045	3.7767E-01	-3.4222E-04	1.6758E-07	-3.3836E-11	298	1500
160	C3H5Br	3-BROMO-1-PROPENE	6.651	2.9532E-01	-2.1107E-04	6.2363E-08	-----	298	1000
161	C3H5Cl	2-CHLOROPROPENE	33.157	1.7339E-01	-4.0298E-05	-3.2447E-08	1.4113E-11	298	1500
162	C3H5Cl	3-CHLOROPROPENE	24.507	1.8758E-01	-2.1732E-05	-6.0427E-08	2.4116E-11	200	1500
163	C3H5ClO	alpha-EPICHLOROHYDRIN	-27.780	5.1614E-01	-5.6307E-04	3.2430E-07	-7.2399E-11	298	1500
164	C3H5ClO2	METHYL CHLOROACETATE	-13.590	5.2003E-01	-5.7146E-04	3.3108E-07	-7.4031E-11	298	1500
165	C3H5ClO2	ETHYL CHLOROFORMATE	32.231	2.5311E-01	-6.0013E-05	-5.0872E-08	2.2667E-11	100	1500
166	C3H5Cl3	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	45.369	2.7047E-01	-1.3637E-04	1.1641E-08	7.2782E-12	200	1500
167	C3H5I	3-iodo-1-propene	10.734	3.0355E-01	-2.3002E-04	7.1450E-08	-----	298	1000
168	C3H5N	PROPIONITRILE	17.618	2.2119E-01	-1.0707E-04	1.7352E-08	1.0610E-12	200	1500
169	C3H5NO	ACRYLAMIDE	13.165	2.6213E-01	-8.5250E-05	-3.5101E-08	2.0435E-11	200	1500
170	C3H5NO	HYDRACRYLONITRILE	8.904	3.1056E-01	-2.0843E-04	6.3273E-08	-6.1415E-12	298	1500
171	C3H5NO	LACTONITRILE	30.071	2.3651E-01	-1.0389E-04	1.4435E-08	1.2163E-12	298	1500
172	C3H5N3O9	NITROGLYCERINE	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
173	C3H6	CYCLOPROPANE	21.172	6.3106E-02	2.9197E-04	-3.2708E-07	9.9730E-11	100	1500
174	C3H6	PROPYLENE	31.298	7.2449E-02	1.9481E-04	-2.1582E-07	6.2974E-11	90	1500
175	C3H6Br2	1,2-DIBROMOPROPANE	13.187	3.7640E-01	-2.7601E-04	8.1906E-08	-----	298	1000
176	C3H6Cl2	1,1-DICHLOROPROPANE	36.554	2.2898E-01	-2.1999E-05	-8.4949E-08	3.4171E-11	150	1500
177	C3H6Cl2	1,2-DICHLOROPROPANE	34.575	2.4270E-01	-5.7726E-05	-4.9517E-08	2.3275E-11	200	1500
178	C3H6Cl2	1,3-DICHLOROPROPANE	37.917	2.3441E-01	-5.7287E-05	-4.5766E-08	2.1530E-11	200	1500
179	C3H6Cl2	2,2-DICHLOROPROPANE	10.720	4.0973E-01	-3.3691E-04	1.1135E-07	-----	298	1000
180	C3H6I2	1,2-DIiodopropene	16.386	3.6405E-01	-2.6305E-04	7.8174E-08	-----	298	1000
181	C3H6O	ACETONE	35.918	9.3896E-02	1.8730E-04	-2.1643E-07	6.3174E-11	100	1500
182	C3H6O	ALLYL ALCOHOL	18.528	2.1287E-01	-2.8839E-05	-6.5014E-08	2.6352E-11	200	1500
183	C3H6O	METHYL VINYL ETHER	15.321	2.3596E-01	-9.9256E-05	7.6893E-09	3.3293E-12	298	1500
184	C3H6O	n-PROPIONALDEHYDE	58.911	4.8385E-03	3.3514E-04	-3.0509E-07	8.3305E-11	200	1500
185	C3H6O	1,2-PROPYLENE OXIDE	29.501	9.2545E-02	2.5626E-04	-2.9921E-07	9.0294E-11	50	1500
186	C3H6O	1,3-PROPYLENE OXIDE	-32.684	4.0929E-01	-3.6377E-04	2.0140E-07	-4.5037E-11	298	1500
187	C3H6O2	ETHYL FORMATE	36.654	1.4922E-01	1.3957E-04	-1.9500E-07	5.9055E-11	100	1500
188	C3H6O2	METHYL ACETATE	-22.287	4.8275E-01	-4.6631E-04	2.3286E-07	-4.3094E-11	298	1200
189	C3H6O2	PROPIONIC ACID	-0.970	3.8307E-01	-3.0872E-04	1.3886E-07	-2.6720E-11	298	1500
190	C3H6O2S	3-MERCAPTOPROPIONIC ACID	26.577	3.7025E-01	-2.9565E-04	1.5526E-07	-4.2314E-11	298	1200
191	C3H6O3	LACTIC ACID	4.890	4.2659E-01	-3.5416E-04	1.5688E-07	-2.9209E-11	298	1500
192	C3H6O3	METHOXYACETIC ACID	-42.782	7.8675E-01	-1.3648E-03	1.3336E-06	-5.0983E-10	298	900
193	C3H6O3	TRIOXANE	4.910	2.6407E-01	6.9003E-05	-1.9208E-07	6.6054E-11	200	1500
194	C3H6S	THIACYCLOBUTANE	-19.537	3.6008E-01	-2.2545E-04	5.4995E-08	-----	298	1000
195	C3H7Br	1-BROMOPROPANE	24.209	2.2956E-01	-2.9974E-05	-6.7459E-08	2.6960E-11	200	1500
196	C3H7Br	2-BROMOPROPANE	28.602	2.1902E-01	-4.6160E-06	-9.1820E-08	3.4572E-11	200	1500
197	C3H7Cl	ISOPROPYL CHLORIDE	45.660	9.5434E-02	2.4116E-04	-2.8322E-07	8.6109E-11	100	1500
198	C3H7Cl	n-PROPYL CHLORIDE	16.153	2.6543E-01	-9.2380E-05	-1.9679E-08	1.4135E-11	200	1500
199	C3H7F	1-FLUOROPROPANE	7.424	2.9058E-01	-1.3549E-04	1.8822E-08	-----	298	1000
200	C3H7F	2-FLUOROPROPANE	-1.643	3.3412E-01	-1.9377E-04	4.3413E-08	-----	298	1000
201	C3H7I	ISOPROPYL IODIDE	29.083	2.2383E-01	-1.7102E-05	-8.1396E-08	3.1643E-11	200	1500
202	C3H7I	n-PROPYL IODIDE	17.653	2.7777E-01	-1.1961E-04	-7.5057E-10	9.3394E-12	200	1500
203	C3H7N	ALLYLAMINE	18.274	2.6583E-01	-1.2102E-04	1.3458E-08	3.2317E-12	298	1500
204	C3H7N	PROPYLENIMINE	-38.561	4.9894E-01	-4.5377E-04	2.2334E-07	-4.4943E-11	298	1500
205	C3H7NO	N,N-DIMETHYLFORMAMIDE	29.310	2.0837E-01	1.0912E-04	-2.1506E-07	7.2177E-11	200	1500
206	C3H7NO	N-METHYLACETAMIDE	-1.339	2.8413E-01	-7.2490E-05	-3.9834E-08	1.8761E-11	298	1500
207	C3H7NO2	1-NITROPROPANE	28.505	2.6062E-01	2.4779E-05	-1.4204E-07	5.0913E-11	200	1500
208	C3H7NO2	2-NITROPROPANE	18.837	3.1000E-01	-5.2946E-05	-9.1409E-08	3.8968E-11	200	1500
209	C3H7NO3	PROPYL-NITRATE	7.081	4.6627E-01	-3.0292E-04	7.6718E-08	-----	298	1000
210	C3H7NO3	ISOPROPYL-NITRATE	-1.985	5.0982E-01	-3.6118E-04	1.0130E-07	-----	298	1000
211	C3H8	PROPANE	28.277	1.1600E-01	1.9597E-04	-2.3271E-07	6.8669E-11	100	1500
212	C3H8O	ISOPROPANOL	25.535	2.1203E-01	5.3492E-05	-1.4727E-07	4.9406E-11	100	1500
213	C3H8O	METHYL ETHYL ETHER	35.289	1.7427E-01	9.4277E-05	-1.4826E-07	4.3296E-11	100	1500
214	C3H8O	n-PROPANOL	31.507	2.3082E-01	-7.8983E-05	6.3696E-09	8.6908E-13	100	2980
215	C3H8O2	2-METHOXYETHANOL	11.416	3.4693E-01	-1.7874E-04	3.1146E-08	1.1718E-12	298	1500
216	C3H8O2	METHYLAL	39.490	2.4609E-02	7.8528E-04	-1.0921E-06	4.5093E-10	298	1000
217	C3H8O2	1,2-PROPYLENE GLYCOL	14.404	3.2565E-01	-7.8741E-05	-1.2420E-07	7.4776E-11	298	1000
218	C3H8O2	1,3-PROPYLENE GLYCOL	7.340	3.5920E-01	-1.5544E-04	-4.8543E-08	4.6374E-11	298	1200
219	C3H8O3	GLYCEROL	9.656	4.2826E-01	-2.6797E-04	3.1794E-08	2.7745E-11	298	1200
220	C3H8S	n-PROPYLMERCAPTAN	37.035	1.9064E-01	7.2562E-05	-1.4440E-07	4.6182E-11	200	1500
221	C3H8S	ISOPROPYL MERCAPTAN	31.652	2.2715E-01	1.2837E-05	-1.0474E-07	3.6662E-11	200	1500
222	C3H8S	ETHYL-METHYL-SULFIDE	16.284	3.0620E-01	-1.4918E-04	2.7207E-08	-----	298	1000
223	C3H9N	n-PROPYLAMINE	7.637	3.3741E-01	-1.6070E-04	2.3836E-08	2.3647E-12	298	1500
224	C3H9N	ISOPROPYLAMINE	-4.758	4.0947E-01	-2.8998E-04	1.1548E-07	-2.0187E-11	298	1500
225	C3H9N	TRIMETHYLAMINE	26.377	2.1496E-01	1.0135E-04	-1.8839E-07	5.9860E-11	200	1500
226	C3H9NO	1-AMINO-2-PROPANOL	-8.396	5.1026E-01	-4.5822E-04	2.3361E-07	-4.9093E-11	298	1500
227	C3H9NO	3-AMINO-1-PROPANOL	7.276	4.0342E-01	-2.5533E-04	8.2617E-08	-1.1842E-11	298	1500
228	C3H9NO	METHYLETHANOLAMINE	-10.405	4.7860E-01	-3.7360E-04	1.6992E-07	-3.5477E-11	298	1200
229	C3H9O4P	TRIMETHYL PHOSPHATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
230	C3H10N2	1,2-PROPANEDIAMINE	3.612	4.5467E-01	-3.0830E-04	1.1190E-07	-1.7969E-11	298	1500
231	C3H10Si	TRIMETHYL SILANE	95.333	-3.8565E-02	4.8559E-04	-4.2881E-07	1.1555E-10	298	1500
232	C4Cl4S	TETRACHLOROTHIOPHENE	11.496	5.2672E-01	-6.0693E-04	3.2882E-07	-6.8095E-11	298	1500
233	C4Cl6	HEXACHLORO-1,3-BUTADIENE	101.108	2.8291E-01	-3.0609E-04	1.5800E-07	-3.1695E-11	298	1500
234	C4F8	OCTAFLUORO-2-BUTENE	-17.951	5.6720E-01	-7.4536E-04	4.9173E-07	-1.3124E-10	298	1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
235	C4F8	OCTAFLUOROCYCLOBUTANE	45.579	4.9467E-01	-4.0808E-04	1.3789E-07	-1.1769E-11	200 1500
236	C4F10	DECAFLUOROBUTANE	38.645	6.1357E-01	-3.5155E-04	-1.2037E-07	1.2661E-10	298 1000
237	C4H2	BUTADIYNE(BIACETYLENE)	24.367	2.2525E-01	-2.2609E-04	8.7977E-08	-----	298 1000
238	C4H2O3	MALEIC ANHYDRIDE	-72.015	1.0423E+00	-1.8716E-03	1.6527E-06	-5.5647E-10	298 1000
239	C4H4	VINYLACETYLENE	19.335	2.2308E-01	-1.3739E-04	3.5667E-08	-1.7996E-12	200 1500
240	C4H4N2	SUCCINONITRILE	15.172	3.2583E-01	-2.2170E-04	5.1492E-08	7.0991E-12	298 1200
241	C4H4O	FURAN	-13.779	3.3489E-01	-2.2273E-04	6.9360E-08	-8.1619E-12	200 2980
242	C4H4O2	DIKETENE	14.704	2.8851E-01	-1.3307E-04	-3.2283E-09	1.3066E-11	298 1200
243	C4H8O3	SUCCINIC ANHYDRIDE	5.950	5.3900E-01	-7.4225E-04	6.0553E-07	-2.0505E-10	298 1000
244	C4H4O4	FUMARIC ACID	15.759	5.9932E-01	-7.0854E-04	4.2980E-07	-1.0058E-10	298 1500
245	C4H4O4	MALEIC ACID	-15.115	5.8902E-01	-6.4675E-04	3.6810E-07	-8.0001E-11	298 1500
246	C4H4S	THIOPHENE	22.037	1.2481E-01	2.4505E-04	-3.3887E-07	1.1175E-10	50 1500
247	C4H5Cl	CHLOROPRENE	20.268	3.1369E-01	-2.4207E-04	9.3958E-08	-1.5001E-11	298 1500
248	C4H5N	trans-CROTONITRILE	-1.466	3.4012E-01	-2.3532E-04	7.3984E-08	-8.2896E-12	250 1500
249	C4H5N	cis-CROTONITRILE	-1.780	3.2415E-01	-2.0418E-04	5.2998E-08	-3.0376E-12	298 1500
250	C4H5N	METHACRYLONITRILE	27.067	2.4619E-01	-1.0446E-04	-2.9851E-10	7.0951E-12	298 1600
251	C4H5N	PYRROLE	-7.680	3.1201E-01	-1.1806E-04	-2.7912E-08	2.1314E-11	200 1500
252	C4H5N	VINYLACETONITRILE	21.519	2.5405E-01	-1.2044E-04	1.1212E-08	4.5239E-12	298 1500
253	C4H5NO2	METHYL CYANOACETATE	-29.108	6.1090E-01	-6.3826E-04	3.0816E-07	-4.1498E-11	298 1200
254	C4H6	CYCLOBUTENE	-27.686	3.9001E-01	-2.6413E-04	7.1350E-08	-----	298 1000
255	C4H6	1,2-BUTADIENE	30.240	1.5688E-01	6.7668E-05	-1.2597E-07	3.9234E-11	100 1500
256	C4H6	1,3-BUTADIENE	18.835	2.0473E-01	6.2485E-05	-1.7148E-07	6.0858E-11	100 1500
257	C4H6	DIMETHYLACETYLENE	41.071	1.0010E-01	1.4966E-04	-1.7838E-07	5.2575E-11	200 1500
258	C4H6	ETHYLACETYLENE	29.857	1.8734E-01	-7.0968E-06	-6.8287E-08	2.5343E-11	200 1500
259	C4H6Cl2	1,3-DICHLORO-trans-2-BUTENE	33.873	3.2586E-01	-2.1702E-04	7.3722E-08	-1.0497E-11	298 1500
260	C4H6Cl2	1,4-DICHLORO-cis-2-BUTENE	0.724	5.0324E-01	-4.5246E-04	2.3322E-07	-5.1035E-11	298 1200
261	C4H6Cl2	1,4-DICHLORO-trans-2-BUTENE	7.205	4.3947E-01	-3.8703E-04	1.8893E-07	-3.8658E-11	298 1500
262	C4H6Cl2	3,4-DICHLORO-1-BUTENE	50.561	2.2753E-01	-4.3374E-05	-1.6965E-08	-4.1852E-12	298 1000
263	C4H6O	trans-CROTONALDEHYDE	11.591	3.2301E-01	-1.3067E-04	1.0791E-08	3.1192E-12	298 1500
264	C4H6O	2,5-DIHYDROFURAN	-11.125	3.4203E-01	-1.4489E-04	-1.3031E-08	1.7017E-11	200 1500
265	C4H6O	DIVINYL ETHER	1.254	3.5057E-01	-2.4183E-04	8.7375E-08	-1.3414E-11	298 1500
266	C4H6O	METHACROLEIN	14.506	1.5922E-01	3.1118E-04	-4.2100E-07	1.4222E-10	298 1200
267	C4H6O2	2-BUTYNE-1,4-DIOL	27.892	3.0363E-01	-1.5388E-04	1.4828E-08	8.3391E-12	298 1200
268	C4H6O2	gamma-BUTYROLACTONE	22.370	1.7297E-01	2.4826E-04	-3.3530E-07	1.0555E-10	100 1500
269	C4H6O2	cis-CROTONIC ACID	0.446	4.7569E-01	-4.4446E-04	2.3234E-07	-5.0122E-11	298 1500
270	C4H6O2	trans-CROTONIC ACID	-5.229	4.5048E-01	-3.8771E-04	1.8280E-07	-3.5447E-11	298 1500
271	C4H6O2	METHACRYLIC ACID	-28.131	5.4744E-01	-5.3877E-04	2.8583E-07	-6.0864E-11	298 1200
272	C4H6O2	METHYL ACRYLATE	1.222	4.0619E-01	-2.8529E-04	9.7153E-08	-1.4073E-11	298 1200
273	C4H6O2	VINYL ACETATE	27.664	2.3366E-01	6.2106E-05	-1.6972E-07	5.7917E-11	100 1500
274	C4H6O3	ACETIC ANHYDRIDE	9.500	3.4425E-01	-8.6736E-05	-7.6769E-08	3.6721E-11	200 1500
275	C4H6O4	SUCCINIC ACID	23.417	4.7462E-01	-3.9265E-04	1.7354E-07	-3.2804E-11	298 1500
276	C4H6O5	DIGLYCOLIC ACID	0.721	6.0311E-01	-5.4772E-04	2.6192E-07	-5.2115E-11	298 1500
277	C4H6O5	MALIC ACID	13.117	5.8833E-01	-5.5236E-04	2.7180E-07	-5.5122E-11	298 1500
278	C4H6O6	TARTARIC ACID	4.526	6.8876E-01	-6.8590E-04	3.5082E-07	-7.2249E-11	298 1500
279	C4H7N	n-BUTYRONITRILE	14.849	3.4077E-01	-2.0780E-04	6.2989E-08	-7.5521E-12	200 1500
280	C4H7N	ISOBUTYRONITRILE	29.844	2.3992E-01	-5.0570E-06	-9.7993E-08	3.6314E-11	200 1500
281	C4H7NO	ACETONE CYANOHYDRIN	14.424	4.1722E-01	-3.1414E-04	1.2671E-07	-2.1994E-11	298 1500
282	C4H7NO	2-METHACRYLAMIDE	-18.333	5.8643E-01	-6.4763E-04	4.4441E-07	-1.2776E-10	298 1200
283	C4H7NO	3-METHOXYPROPIONITRILE	9.316	3.9156E-01	-2.3090E-04	5.4563E-08	-2.5331E-12	298 1500
284	C4H7NO	2-PYRROLIDONE	14.880	2.0967E-01	2.3448E-04	-3.3759E-07	1.0745E-10	100 1500
285	C4H8	1-BUTENE	24.915	2.0648E-01	5.9828E-05	-1.4166E-07	4.7053E-11	200 1500
286	C4H8	cis-2-BUTENE	29.137	1.4008E-01	1.9109E-04	-2.3717E-07	7.0962E-11	200 1500
287	C4H8	trans-2-BUTENE	40.312	1.3472E-01	1.6877E-04	-2.1140E-07	6.3263E-11	200 1500
288	C4H8	CYCLOBUTANE	22.621	8.8506E-02	3.9106E-04	-4.3201E-07	1.2970E-10	100 1500
289	C4H8	ISOBUTENE	32.918	1.8546E-01	7.7876E-05	-1.4645E-07	4.6867E-11	200 1500
290	C4H8Br2	1,2-DIBROMOBUTANE	17.413	4.5325E-01	-3.1397E-04	8.8061E-08	-----	298 1000
291	C4H8Br2	2,3-DIBROMOBUTANE	6.074	4.9421E-01	-3.5639E-04	1.0175E-07	-----	298 1000
292	C4H8Cl2	1,4-DICHLOROBUTANE	0.074	5.1333E-01	-4.3439E-04	2.0527E-07	-4.1398E-11	298 1500
293	C4H8I2	1,2-DIODOBUTANE	23.107	4.2961E-01	-2.8503E-04	7.7103E-08	-----	298 1000
294	C4H8O	n-BUTYRALDEHYDE	64.374	6.4776E-02	3.5143E-04	-3.5371E-07	1.0082E-10	200 1500
295	C4H8O	ISOBUTYRALDEHYDE	-1.360	4.0519E-01	-2.5176E-04	6.0505E-08	6.4389E-12	298 1200
296	C4H8O	1,2-EPOXYBUTANE	6.590	3.4252E-01	-1.2004E-04	-3.3075E-08	2.1868E-11	200 1500
297	C4H8O	METHYL ETHYL KETONE	37.369	2.3045E-01	5.7387E-06	-8.8168E-08	2.9637E-11	200 1500
298	C4H8O	ETHYL VINYL ETHER	-0.946	4.0720E-01	-2.8730E-04	1.1776E-07	-2.1862E-11	298 1500
299	C4H8O	TETRAHYDROFURAN	32.887	2.4554E-02	6.0226E-04	-6.2385E-07	1.8528E-10	50 1500
300	C4H8O2	cis-2-BUTENE-1,4-DIOL	0.759	4.0598E-01	-2.1465E-04	4.8876E-08	-9.9659E-12	298 1000
301	C4H8O2	trans-2-BUTENE-1,4-DIOL	10.706	4.0048E-01	-2.5577E-04	1.1699E-07	-3.9430E-11	298 1000
302	C4H8O2	ISOBUTYRIC ACID	-32.990	5.9238E-01	-5.0629E-04	2.0791E-07	-2.4372E-11	298 1000
303	C4H8O2	n-BUTYRIC ACID	14.368	3.9591E-01	-1.8906E-04	-7.6462E-09	2.0812E-11	298 1200
304	C4H8O2	1,4-DIOXANE	-46.223	5.7263E-01	-3.8800E-04	1.1392E-07	-9.0669E-12	298 1500
305	C4H8O2	ETHYL ACETATE	69.848	8.2338E-02	3.7159E-04	-4.1129E-07	1.2369E-10	200 1500
306	C4H8O2	METHYL PROPIONATE	-131.953	1.3767E+00	-2.4790E-03	2.2378E-06	-7.6784E-10	298 1000
307	C4H8O2	n-PROPYL FORMATE	-23.921	5.9124E-01	-5.6041E-04	2.9107E-07	-6.1164E-11	298 1500
308	C4H8O2S	SULFOLANE	2.498	4.2069E-01	-9.2595E-05	-1.1878E-07	5.2922E-11	298 1500
309	C4H8S	TETRAHYDROTHIOPHENE	-6.161	3.7746E-01	-1.3544E-04	-3.9013E-08	2.5996E-11	200 1500
310	C4H9Br	1-BROMOBUTANE	29.412	2.9219E-01	-2.6578E-05	-9.7812E-08	3.7812E-11	200 1500
311	C4H9Br	2-BROMOBUTANE	-2.986	4.7747E-01	-3.5869E-04	1.4697E-07	-2.5768E-11	298 1500
312	C4H9Cl	n-BUTYL CHLORIDE	42.595	2.0225E-01	1.5618E-04	-2.4192E-07	7.7385E-11	150 1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

		$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)						
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
313	C4H9Cl	sec-BUTYL CHLORIDE	41.573	2.1551E-01	1.3137E-04	-2.2399E-07	7.2509E-11	150 1500
314	C4H9Cl	tert-BUTYL CHLORIDE	18.882	3.8038E-01	-1.9282E-04	2.7361E-08	5.0124E-12	200 1500
315	C4H9I	2-iodo-2-methylpropane	-5.317	5.2116E-01	-3.9394E-04	1.2042E-07	-----	298 1000
316	C4H9N	pyrrolidine	-8.802	3.1151E-01	6.6087E-05	-2.0528E-07	7.1304E-11	200 1500
317	C4H9NO	N,N-dimethylacetamide	-21.561	5.5114E-01	-4.1728E-04	1.8505E-07	-3.6554E-11	298 1500
318	C4H9NO	morpholine	-35.984	6.7041E-01	-6.1690E-04	3.0813E-07	-6.3936E-11	298 1500
319	C4H9NO2	1-nitrobutane	-4.174	5.2112E-01	-3.1991E-04	7.6446E-08	-----	298 1000
320	C4H9NO2	2-nitrobutane	-12.062	5.5229E-01	-3.5602E-04	9.1671E-08	-----	298 1000
321	C4H10	n-butane	20.056	2.8153E-01	-1.3143E-05	-9.4571E-08	3.4149E-11	200 1500
322	C4H10	isobutane	6.772	3.4147E-01	-1.0271E-04	-3.6849E-08	2.0429E-11	200 1500
323	C4H10N2	pi-perazine	-64.055	7.9174E-01	-6.6296E-04	2.4423E-07	-3.0828E-11	298 1500
324	C4H10O	n-butanol	8.157	4.1032E-01	-2.2645E-04	6.0372E-08	-6.2802E-12	200 2980
325	C4H10O	sec-butanol	22.465	3.5134E-01	-1.2858E-04	-1.1931E-08	1.2940E-11	200 1500
326	C4H10O	tert-butanol	8.866	4.2394E-01	-2.4206E-04	6.1419E-08	-4.3829E-12	200 1500
327	C4H10O	diethyl ether	35.979	2.8444E-01	-1.2673E-06	-1.0128E-07	3.4529E-11	200 1500
328	C4H10O	methyl-propyl-ether	22.326	3.3416E-01	-1.0595E-04	-5.9045E-09	-----	298 1000
329	C4H10O	methyl isopropyl ether	48.135	1.8178E-01	2.0299E-04	-2.6456E-07	7.9645E-11	200 1500
330	C4H10O	isobutanol	71.169	-3.9114E-01	3.1468E-03	-5.6342E-06	3.3290E-09	200 700
331	C4H10O2	1,3-butanediol	1.100	5.2567E-01	-4.0675E-04	1.7268E-07	-3.0418E-11	298 1500
332	C4H10O2	1,4-butanediol	-7.265	5.5344E-01	-4.5299E-04	2.0616E-07	-3.8161E-11	298 1500
333	C4H10O2	2,3-butanediol	-1.698	5.3981E-01	-3.9103E-04	1.2195E-07	-3.1009E-12	298 1200
334	C4H10O2	t-butyl hydroperoxide	2.100	5.5655E-01	-4.5845E-04	2.1168E-07	-4.2051E-11	298 1500
335	C4H10O2	1,2-dimethoxyethane	6.542	4.6066E-01	-2.6242E-04	6.5670E-08	-5.4689E-12	298 1500
336	C4H10O2	2-ethoxyethanol	-0.213	4.8872E-01	-3.0001E-04	8.1972E-08	-7.4878E-12	298 1500
337	C4H10O3	diethylene glycol	13.906	4.8367E-01	-2.7706E-04	6.2086E-08	-1.5319E-12	200 1500
338	C4H10O4S	diethyl sulfate	-16.764	6.7731E-01	-6.1231E-04	2.9140E-07	-5.6686E-11	298 1500
339	C4H10S	n-butyl mercaptan	46.393	2.2674E-01	1.2687E-04	-1.9438E-07	5.8247E-11	200 1500
340	C4H10S	isobutyl mercaptan	37.177	2.8839E-01	1.8512E-05	-1.3850E-07	4.8919E-11	200 1500
341	C4H10S	sec-butyl mercaptan	41.398	2.6634E-01	5.7961E-05	-1.6133E-07	5.3327E-11	200 1500
342	C4H10S	tert-butyl mercaptan	30.326	3.3585E-01	-5.0433E-05	-9.9820E-08	4.0942E-11	200 1500
343	C4H10S	diethyl sulfide	49.361	2.0829E-01	1.5828E-04	-2.2475E-07	6.8109E-11	200 1500
344	C4H10S	isopropyl-methyl-sulfide	13.619	4.0498E-01	-2.0941E-04	5.1463E-08	-----	298 1000
345	C4H10S	methyl-propyl-sulfide	16.011	3.9193E-01	-1.8498E-04	3.2783E-08	-----	298 1000
346	C4H10S2	diethyl disulfide	50.958	3.3793E-01	-6.5255E-05	-8.3102E-08	3.5651E-11	200 1500
347	C4H11N	n-butylamine	45.381	2.2649E-01	1.5750E-04	-2.4190E-07	7.5475E-11	200 1500
348	C4H11N	isobutylamine	-1.698	4.7082E-01	-2.7368E-04	7.1498E-08	-5.8916E-12	298 1500
349	C4H11N	sec-butylamine	18.784	3.5654E-01	-4.1983E-05	-1.1648E-07	4.5681E-11	200 1500
350	C4H11N	tert-butylamine	28.406	3.3042E-01	4.8961E-06	-1.5250E-07	5.6636E-11	200 1500
351	C4H11N	diethylamine	40.851	2.3495E-01	1.6164E-04	-2.5266E-07	7.9398E-11	200 1500
352	C4H11NO	dimethylethanolamine	-18.435	6.0239E-01	-4.4463E-04	1.6514E-07	-2.2558E-11	298 1200
353	C4H11NO2	diethanolamine	-5.264	6.1929E-01	-4.9545E-04	2.1789E-07	-3.9897E-11	298 1500
354	C4H11NO2	2-aminoethoxyethanol	-5.199	6.2316E-01	-5.2386E-04	2.6796E-07	-6.4932E-11	298 1200
355	C4H12N2O	N-aminoethyl ethanolamine	-13.558	6.7312E-01	-5.4235E-04	2.4320E-07	-4.6505E-11	298 1500
356	C4H12Si	tetramethylsilane	61.616	2.9614E-01	-1.0454E-05	-9.9222E-08	3.5679E-11	200 1500
357	C4H13N3	diethylene triamine	-8.147	6.7234E-01	-5.1124E-04	2.1737E-07	-4.0511E-11	298 1500
358	C5Cl6	hexachlorocyclopentadiene	38.750	8.0546E-01	-1.5519E-03	1.4183E-06	-4.8251E-10	298 1000
359	C5H4O2	furfural	15.470	2.9835E-01	-1.9177E-05	-1.4621E-07	5.9506E-11	100 1500
360	C5H5N	pyridine	23.262	1.1251E-01	3.7351E-04	-4.5402E-07	1.4286E-10	50 1500
361	C5H6	cyclopentadiene	-25.616	4.2049E-01	-2.7180E-04	7.2995E-08	-3.9537E-12	200 1500
362	C5H6	2-methyl-1-butene-3-yne	11.399	3.4714E-01	-2.3506E-04	7.6877E-08	-9.4000E-12	298 1500
363	C5H6	1-pentene-3-yne	9.264	3.3995E-01	-2.3573E-04	8.8403E-08	-1.4533E-11	298 1500
364	C5H6	1-pentene-4-yne	11.588	3.4489E-01	-2.5839E-04	1.0999E-07	-2.0576E-11	298 1500
365	C5H6N2	glutaronitrile	18.975	3.9760E-01	-2.4793E-04	6.6492E-08	-6.1305E-12	298 1500
366	C5H6O2	furfuryl alcohol	-7.696	5.5491E-01	-4.9754E-04	2.3193E-07	-4.4815E-11	298 1500
367	C5H6O3	glutaric anhydride	-39.768	6.2221E-01	-3.8554E-04	1.0999E-07	-1.1564E-11	298 1500
368	C5H6O4	citraconic acid	-44.280	9.7863E-01	-1.3251E-03	9.3278E-07	-2.5668E-10	298 1200
369	C5H6O4	itaconic acid	-29.874	8.3391E-01	-1.0039E-03	6.4524E-07	-1.6726E-10	298 1200
370	C5H6S	2-methylthiophene	-19.124	4.7660E-01	-3.3969E-04	9.6826E-08	-----	298 1000
371	C5H6S	3-methylthiophene	-23.147	4.9802E-01	-3.7681E-04	1.1365E-07	-----	298 1000
372	C5H7N	N-methylpyrrole	-42.333	5.9879E-01	-5.0928E-04	2.4282E-07	-4.8924E-11	298 1500
373	C5H7NO2	ethyl cyanoacetate	-28.861	6.9064E-01	-6.7310E-04	3.4241E-07	-7.0338E-11	298 1500
374	C5H8	cyclopentene	-4.355	2.5989E-01	1.1735E-04	-2.3049E-07	7.6078E-11	200 1500
375	C5H8	isoprene	-0.007	4.2828E-01	-3.0377E-04	1.1890E-07	-2.0653E-11	200 1500
376	C5H8	3-methyl-1,2-butadiene	33.913	2.2132E-01	4.9559E-05	-1.2900E-07	4.1214E-11	150 1500
377	C5H8	2-methyl-1,3-butadiene	-15.114	5.1405E-01	-4.1618E-04	1.3870E-07	-----	298 1000
378	C5H8	1,2-pentadiene	15.041	3.3233E-01	-1.2798E-04	-1.0733E-08	1.3140E-11	200 1500
379	C5H8	cis-1,3-pentadiene	11.441	3.2718E-01	-1.0552E-04	-3.1107E-08	1.8831E-11	200 1500
380	C5H8	trans-1,3-pentadiene	10.384	3.4613E-01	-1.4819E-04	3.3729E-09	9.3660E-12	200 1500
381	C5H8	1,4-pentadiene	28.759	2.2687E-01	1.0259E-04	-1.9453E-07	6.2357E-11	100 1500
382	C5H8	2,3-pentadiene	29.678	2.8033E-01	-7.3692E-05	-3.3295E-08	1.5621E-11	150 1500
383	C5H8	1-pentyne	18.298	3.5705E-01	-2.0856E-04	5.4791E-08	-4.3208E-12	200 1500
384	C5H8	2-pentyne	12.196	3.3446E-01	-1.5693E-04	2.5306E-08	-----	298 1000
385	C5H8	3-methyl-1-butyne	33.392	2.6136E-01	-1.6275E-05	-9.4718E-08	3.6363E-11	200 1500
386	C5H8	spiropentane	-41.488	5.3877E-01	-3.8261E-04	1.0916E-07	-----	298 1000
387	C5H8N4O12	pentaerythritol tetranitrate	-----	-----	-----	-----	-----	-----
388	C5H8O	cyclopentanone	-29.270	5.0540E-01	-3.4447E-04	1.3119E-07	-2.6198E-11	298 1500
389	C5H8O	methyl isopropenyl ketone	-6.032	4.4160E-01	-2.5697E-04	5.3823E-08	2.4497E-12	298 1200
390	C5H8O2	acetylacetone	-6.071	5.0469E-01	-3.9471E-04	2.1259E-07	-6.0544E-11	298 1200

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
391	C5H8O2	ALLYL ACETATE	-20.793	6.0941E-01	-5.2082E-04	2.3682E-07	-4.6892E-11	298 1500
392	C5H8O2	ETHYL ACRYLATE	-9.599	5.4466E-01	-4.1029E-04	1.6344E-07	-3.1021E-11	298 1500
393	C5H8O2	METHYL METHACRYLATE	-25.526	6.0628E-01	-5.0627E-04	2.2388E-07	-4.2286E-11	298 1500
394	C5H8O2	VINYL PROPIONATE	-1.977	4.8760E-01	-2.8547E-04	4.8284E-08	7.1078E-12	298 1500
395	C5H8O3	2-HYDROXYETHYL ACRYLATE	-36.842	8.7884E-01	-1.0766E-03	6.9101E-07	-1.7137E-10	298 1200
396	C5H8O3	LEVULINIC ACID	32.518	4.3890E-01	-2.5355E-04	6.9217E-08	-1.1605E-11	298 1500
397	C5H8O3	METHYL ACETOACETATE	-27.476	6.8761E-01	-6.6106E-04	3.5816E-07	-8.1625E-11	298 1500
398	C5H8O4	GLUTARIC ACID	2.795	7.1090E-01	-7.9710E-04	5.4496E-07	-1.6341E-10	298 1200
399	C5H9N	VALERONITRILE	20.430	3.9187E-01	-1.7706E-04	1.0768E-08	9.2411E-12	200 1500
400	C5H9NO	n-BUTYL ISOCYANATE	25.162	3.1973E-01	3.5100E-05	-1.7032E-07	5.8493E-11	298 1100
401	C5H9NO	N-METHYL-2-PYRROLIDONE	-46.964	5.6527E-01	-1.6330E-04	-1.9993E-07	1.2780E-10	298 1200
402	C5H9NO4	L-GLUTAMIC ACID	14.969	6.8061E-01	-5.5977E-04	2.4091E-07	-4.3844E-11	298 1500
403	C5H10	CYCLOPENTANE	19.735	1.1636E-01	5.1261E-04	-5.6745E-07	1.7045E-10	100 1500
404	C5H10	2-METHYL-1-BUTENE	36.231	2.5093E-01	8.9416E-05	-1.8917E-07	6.2160E-11	200 1500
405	C5H10	2-METHYL-2-BUTENE	39.489	1.9866E-01	1.8422E-04	-2.5432E-07	7.7912E-11	200 1500
406	C5H10	3-METHYL-1-BUTENE	34.280	3.1601E-01	-6.1287E-05	-6.6735E-08	2.8688E-11	200 1500
407	C5H10	1-PENTENE	37.101	2.3664E-01	1.1834E-04	-2.1139E-07	6.8054E-11	200 1500
408	C5H10	cis-2-PENTENE	24.729	2.5447E-01	1.1355E-04	-2.1629E-07	7.0502E-11	200 1500
409	C5H10	trans-2-PENTENE	38.859	2.2159E-01	1.3722E-04	-2.1992E-07	6.9261E-11	200 1500
410	C5H10Br2	2,3-DIBROMO-2-METHYLBUTANE	-5.975	6.4948E-01	-4.8539E-04	1.4253E-07	-----	298 1000
411	C5H10Cl2	1,5-DICHLOROPENTANE	4.347	5.8619E-01	-4.6054E-04	2.0428E-07	-3.9364E-11	298 1500
412	C5H10O	METHYL ISOPROPYL KETONE	-13.343	4.9441E-01	-2.5117E-04	2.5991E-08	9.7133E-12	298 1500
413	C5H10O	2-PENTANONE	42.356	2.7425E-01	6.3786E-05	-1.6870E-07	5.5342E-11	200 1500
414	C5H10O	DIETHYL KETONE	49.800	2.6897E-01	5.0669E-05	-1.5227E-07	4.9510E-11	200 1500
415	C5H10O	VALERALDEHYDE	26.913	3.5952E-01	-6.7847E-05	-7.0728E-08	2.9503E-11	273 1500
416	C5H10O2	n-BUTYL FORMATE	-23.729	6.8205E-01	-6.0993E-04	3.0105E-07	-6.1033E-11	298 1500
417	C5H10O2	ETHYL PROPIONATE	139.382	-4.8565E-01	2.3071E-03	-2.7597E-06	1.0859E-09	298 1000
418	C5H10O2	ISOBUTYL FORMATE	-26.232	6.8785E-01	-6.0138E-04	2.8357E-07	-5.3862E-11	298 1500
419	C5H10O2	ISOPROPYL ACETATE	-45.829	7.9654E-01	-7.9890E-04	4.3031E-07	-9.2988E-11	298 1500
420	C5H10O2	n-PROPYL ACETATE	21.906	4.2733E-01	-1.3858E-04	-5.4238E-08	3.0118E-11	298 1500
421	C5H10O2	METHYL n-BUTYRATE	-39.235	8.0965E-01	-9.2286E-04	6.0084E-07	-1.6118E-10	298 1200
422	C5H10O2	2-METHYLBUTYRIC ACID	-19.156	6.0607E-01	-4.1921E-04	1.3696E-07	-1.7062E-11	298 1500
423	C5H10O2	ISOVALERIC ACID	-5.803	5.9939E-01	-4.6602E-04	1.9713E-07	-3.6253E-11	298 1500
424	C5H10O2	VALERIC ACID	-12.596	6.5474E-01	-5.8609E-04	2.8904E-07	-5.8646E-11	298 1500
425	C5H10O2	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	-21.588	7.0118E-01	-6.2383E-04	3.0249E-07	-6.1395E-11	298 1500
426	C5H10O2S	3-METHYL SULFOLANE	2.742	4.4985E-01	1.4128E-04	-4.9419E-07	2.1699E-10	298 1200
427	C5H10O3	DIETHYL CARBONATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----
428	C5H10O3	ETHYL LACTATE	-30.734	8.0038E-01	-8.1025E-04	4.4743E-07	-9.9928E-11	298 1500
429	C5H10S	THIACYCLOHEXANE	-52.045	6.3212E-01	-3.3873E-04	6.1028E-08	-----	298 1000
430	C5H10S	CYCLOPENTANETHIOL	-36.386	5.8174E-01	-3.5459E-04	8.4634E-08	-----	298 1000
431	C5H11Br	1-BROMOPENTANE	1.254	5.2886E-01	-3.2580E-04	8.1718E-08	-----	298 1000
432	C5H11Cl	1-CHLOROPENTANE	22.357	4.1358E-01	-1.2716E-04	-4.7751E-08	2.7004E-11	200 1500
433	C5H11Cl	1-CHLORO-3-METHYLBUTANE	-2.501	5.5928E-01	-3.7295E-04	1.0363E-07	-----	298 1000
434	C5H11Cl	2-CHLORO-2-METHYLBUTANE	-10.851	5.8312E-01	-3.8563E-04	1.0259E-07	-----	298 1000
435	C5H11N	N-METHYLPYRROLIDINE	-63.618	6.8971E-01	-4.8249E-04	1.6504E-07	-2.1384E-11	298 1500
436	C5H11N	PIPERIDINE	-53.313	7.5541E-01	-5.6470E-04	1.6625E-07	-1.0457E-11	298 1500
437	C5H11NO	tert-BUTYLFORMAMIDE	-18.333	5.7294E-01	-2.9150E-04	1.2192E-08	3.9907E-11	298 1200
438	C5H12	ISOPENTANE	-0.881	4.7498E-01	-2.4797E-04	6.7512E-08	-8.5343E-12	200 1500
439	C5H12	NEOPENTANE	-17.917	5.7236E-01	-4.1705E-04	2.1158E-07	-5.1006E-11	200 1500
440	C5H12	n-PENTANE	26.671	3.2324E-01	4.2820E-05	-1.6639E-07	5.6036E-11	200 1500
441	C5H12O	2,2-DIMETHYL-1-PROPANOL	-24.052	6.5427E-01	-4.7894E-04	1.6991E-07	-2.1290E-11	298 1500
442	C5H12O	tert-PENTYL-ALCOHOL	-9.454	5.6409E-01	-3.2853E-04	7.2178E-08	-----	298 1000
443	C5H12O	2-METHYL-1-BUTANOL	-19.293	6.3101E-01	-4.7958E-04	1.9533E-07	-3.1575E-11	298 1500
444	C5H12O	2-METHYL-2-BUTANOL	-16.955	6.5298E-01	-5.4260E-04	2.6069E-07	-5.4462E-11	298 1200
445	C5H12O	3-METHYL-1-BUTANOL	17.380	3.8036E-01	9.0875E-05	-3.3684E-07	1.4257E-10	298 1200
446	C5H12O	3-METHYL-2-BUTANOL	-14.366	6.2608E-01	-4.8709E-04	2.1430E-07	-4.1705E-11	298 1500
447	C5H12O	1-PENTANOL	9.175	4.7662E-01	-1.9542E-04	-1.3991E-08	2.0685E-11	200 1500
448	C5H12O	2-PENTANOL	-7.077	5.9369E-01	-4.3971E-04	1.8499E-07	-3.5235E-11	298 1400
449	C5H12O	3-PENTANOL	61.233	7.9840E-02	9.0823E-04	-1.2984E-06	5.4866E-10	298 1000
450	C5H12O	METHYL sec-BUTYL ETHER	-0.104	5.5588E-01	-3.6662E-04	1.3167E-07	-2.0764E-11	298 1500
451	C5H12O	METHYL tert-BUTYL ETHER	39.585	2.8849E-01	1.3825E-04	-2.5131E-07	8.0807E-11	200 1500
452	C5H12O	METHYL ISOBUTYL ETHER	-11.287	5.9389E-01	-4.4085E-04	2.0554E-07	-4.9208E-11	298 1200
453	C5H12O	ETHYL PROPYL ETHER	14.457	4.5609E-01	-1.7751E-04	-1.1636E-08	1.6934E-11	298 1500
454	C5H12O2	ETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	-16.033	6.8258E-01	-5.7788E-04	2.9935E-07	-7.2869E-11	298 1200
455	C5H12O2	NEOPENTYL GLYCOL	-11.513	6.5964E-01	-4.8149E-04	1.8407E-07	-3.1786E-11	298 1500
456	C5H12O2	1,5-PENTANEDIOL	-2.425	6.1055E-01	-4.3769E-04	1.6872E-07	-2.6880E-11	298 1500
457	C5H12O3	2-(2-METHOXYETHOXY)ETHANOL	-22.744	7.9858E-01	-8.1464E-04	5.3038E-07	-1.5753E-10	298 1200
458	C5H12O4	PENTAERYTHRITOL	-4.675	7.5699E-01	-6.1689E-04	2.7195E-07	-5.3121E-11	298 1400
459	C5H12S	n-PENTYL MERCAPTAN	19.604	4.6839E-01	-2.0875E-04	4.3242E-08	-7.5836E-12	273 1500
460	C5H12S	BUTYL-METHYL-SULFIDE	18.502	4.6735E-01	-2.0221E-04	3.0437E-08	-----	298 1000
461	C5H12S	ETHYL-PROPYL-SULFIDE	15.706	4.7037E-01	-1.9889E-04	2.8258E-08	-----	298 1000
462	C5H12S	2-METHYL-2-BUTANETHIOL	3.470	5.6358E-01	-3.3987E-04	7.9358E-08	-----	298 1000
463	C5H13N	n-PENTYLAMINE	6.603	5.2073E-01	-2.5708E-04	3.9765E-08	3.5264E-12	298 1500
464	C5H13NO2	METHYL DIETHANOLAMINE	-16.817	7.4349E-01	-5.5635E-04	2.1535E-07	-3.4622E-11	298 1500
465	C6Cl6	HEXACHLOROBENZENE	40.828	6.3403E-01	-7.3328E-04	4.0581E-07	-8.6866E-11	200 1500
466	C6F6	HEXAFLUOROBENZENE	56.398	4.1193E-01	-2.7480E-04	8.4094E-08	-7.9692E-12	200 1500
467	C6H3Cl2NO4	1-CHLORO-2,4-DINITROBENZENE	36.588	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200 1500
468	C6H3Cl2NO2	1,2-DICHLORO-4-NITROBENZENE	20.678	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200 1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
469	C6H3Cl3	1,2,4-TRICHLOROBENZENE	2.547	5.6873E-01	-5.5217E-04	2.6984E-07	-5.2816E-11	200	1500
470	C6H3N3O6	1,3,5-TRINITROBENZENE	52.498	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
471	C6H4Br2	m-DIBROMOBENZENE	23.494	3.7580E-01	-1.7947E-04	-1.2488E-08	2.2028E-11	150	1500
472	C6H4ClNO2	m-CHLORONITROBENZENE	2.238	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
473	C6H4ClNO2	o-CHLORONITROBENZENE	5.599	5.4506E-01	-3.6483E-04	8.1076E-08	3.5675E-12	200	1500
474	C6H4ClNO2	p-CHLORONITROBENZENE	2.861	5.6351E-01	-3.9804E-04	1.0486E-07	-2.4547E-12	200	1500
475	C6H4Cl2	m-DICHLOROBENZENE	-9.294	5.4269E-01	-4.8322E-04	2.1721E-07	-3.9293E-11	200	1500
476	C6H4Cl2	o-DICHLOROBENZENE	-9.539	5.4073E-01	-4.7821E-04	2.1330E-07	-3.8284E-11	200	1500
477	C6H4Cl2	p-DICHLOROBENZENE	-9.451	5.4233E-01	-4.8126E-04	2.1537E-07	-3.8775E-11	200	1500
478	C6H4F2	m-DIFLUOROBENZENE	-26.742	5.7170E-01	-4.6421E-04	1.4498E-07	-----	298	1000
479	C6H4F2	o-DIFLUOROBENZENE	-24.499	5.5919E-01	-4.4225E-04	1.3656E-07	-----	298	1000
480	C6H4F2	p-DIFLUOROBENZENE	-25.837	5.7137E-01	-4.6668E-04	1.4709E-07	-----	298	1000
481	C6H4N2O4	m-DINITROBENZENE	18.148	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
482	C6H4N2O4	o-DINITROBENZENE	18.148	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
483	C6H4N2O4	p-DINITROBENZENE	18.148	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
484	C6H5Br	BROMOBENZENE	10.965	3.3493E-01	-7.7630E-05	-9.0065E-08	4.1966E-11	200	1500
485	C6H5Cl	MONOCHLOROBENZENE	27.315	2.4405E-01	9.3748E-05	-2.2377E-07	8.0155E-11	200	1500
486	C6H5ClO	m-CHLOROPHENOL	-30.256	6.6657E-01	-6.5807E-04	3.2782E-07	-6.5085E-11	298	1500
487	C6H5ClO	o-CHLOROPHENOL	-30.256	6.6657E-01	-6.5807E-04	3.2782E-07	-6.5085E-11	298	1500
488	C6H5ClO	p-CHLOROPHENOL	-30.256	6.6657E-01	-6.5807E-04	3.2782E-07	-6.5085E-11	298	1500
489	C6H5Cl2N	3,4-DICHLOROANILINE	-12.710	6.9240E-01	-7.0094E-04	3.5781E-07	-7.2645E-11	298	1500
490	C6H5F	FLUOROBENZENE	-7.810	4.1311E-01	-1.9932E-04	-6.0575E-09	2.0763E-11	200	1500
491	C6H5I	IODOBENZENE	5.014	3.8494E-01	-1.7674E-04	-1.4239E-08	2.1809E-11	200	1500
492	C6H5NO2	NITROBENZENE	-16.202	5.6182E-01	-3.9302E-04	1.0043E-07	-1.2252E-12	200	1500
493	C6H6	BENZENE	-31.368	4.7460E-01	-3.1137E-04	8.5237E-08	-5.0524E-12	200	1500
494	C6H6ClN	m-CHLOROANILINE	-24.493	6.6130E-01	-6.1856E-04	2.9376E-07	-5.6020E-11	298	1500
495	C6H6ClN	o-CHLOROANILINE	-24.493	6.6130E-01	-6.1856E-04	2.9376E-07	-5.6020E-11	298	1500
496	C6H6ClN	p-CHLOROANILINE	-24.135	6.5666E-01	-6.0355E-04	2.7595E-07	-4.8992E-11	298	1200
497	C6H6N2	cis-DICYANO-1-BUTENE	6.870	4.1827E-01	-7.9183E-05	-2.1892E-07	1.2143E-10	298	1000
498	C6H6N2	trans-DICYANO-1-BUTENE	-1.571	5.5288E-01	-4.8007E-04	2.1814E-07	-4.0133E-11	298	1500
499	C6H6N2	1,4-DICYANO-2-BUTENE	39.740	2.7876E-01	1.3446E-04	-3.5716E-07	1.5299E-10	298	1000
500	C6H6N2O2	m-NITROANILINE	12.288	5.7313E-01	-4.5651E-04	1.8410E-07	-2.9867E-11	200	1500
501	C6H6N2O2	o-NITROANILINE	12.288	5.7313E-01	-4.5651E-04	1.8410E-07	-2.9867E-11	200	1500
502	C6H6N2O2	p-NITROANILINE	12.288	5.7313E-01	-4.5651E-04	1.8410E-07	-2.9867E-11	200	1500
503	C6H6O	PHENOL	4.408	3.6338E-01	-6.0417E-05	-1.2794E-07	5.5287E-11	100	1500
504	C6H6O2	1,2-BENZENEDIOL	-24.649	6.2268E-01	-5.0070E-04	1.8696E-07	-2.5672E-11	200	1500
505	C6H6O2	1,3-BENZENEDIOL	-28.476	6.8792E-01	-6.7225E-04	3.3593E-07	-6.7411E-11	200	1500
506	C6H6O2	p-HYDROQUINONE	-23.109	6.6077E-01	-6.4518E-04	3.2817E-07	-6.7604E-11	200	1500
507	C6H6O3	1,2,3-BENZENETRIOL	-23.381	7.5537E-01	-7.6515E-04	3.8498E-07	-7.6871E-11	298	1500
508	C6H6S	PHENYL MERCAPTAN	-5.259	4.4764E-01	-2.3973E-04	2.2703E-08	1.2746E-11	200	1500
509	C6H7N	ANILINE	-22.062	5.7313E-01	-4.5651E-04	1.8410E-07	-2.9867E-11	200	1500
510	C6H7N	2-METHYLPYRIDINE	-17.819	4.7591E-01	-2.5380E-04	3.3280E-08	8.7218E-12	200	1500
511	C6H7N	3-METHYLPYRIDINE	-16.136	4.6342E-01	-2.2923E-04	1.6537E-08	1.2749E-11	200	1500
512	C6H7N	4-METHYLPYRIDINE	-18.170	4.7450E-01	-2.4996E-04	3.0282E-08	9.4921E-12	200	1500
513	C6H8	1,3-CYCLOHEXADIENE	9.959	2.5557E-01	2.0432E-04	-3.3043E-07	1.0763E-10	100	1500
514	C6H8	METHYLCYCLOPENTADIENE	-59.926	7.1827E-01	-6.8011E-04	3.3399E-07	-6.6324E-11	298	1500
515	C6H8N2	ADIPONITRILE	46.703	2.1098E-01	6.0849E-04	-1.0564E-06	4.7126E-10	298	1000
516	C6H8N2	METHYLGLUTARONITRILE	32.077	4.3754E-01	-2.3741E-04	4.6871E-08	4.8993E-13	298	1500
517	C6H8N2	m-PHENYLENEDIAMINE	-35.663	7.5211E-01	-7.0735E-04	3.3963E-07	-6.5853E-11	298	1500
518	C6H8N2	o-PHENYLENEDIAMINE	-35.663	7.5211E-01	-7.0735E-04	3.3963E-07	-6.5853E-11	298	1500
519	C6H8N2	p-PHENYLENEDIAMINE	-35.663	7.5211E-01	-7.0735E-04	3.3963E-07	-6.5853E-11	298	1500
520	C6H8N2	PHENYLHYDRAZINE	-53.605	7.8460E-01	-7.4455E-04	3.6656E-07	-7.3334E-11	298	1500
521	C6H8N2O	BIS(CYANOETHYL)ETHER	30.043	4.8287E-01	-2.4564E-04	1.9368E-08	1.2919E-11	298	1500
522	C6H8O4	DIMETHYL MALEATE	-1.849	7.6196E-01	-7.8473E-04	4.5797E-07	-1.1125E-10	298	1200
523	C6H8O6	ASCORBIC ACID	-7.357	1.0100E+00	-1.1580E-03	6.7650E-07	-1.5220E-10	298	1500
524	C6H8O7	CITRIC ACID	20.051	8.5219E-01	-8.1655E-04	4.0741E-07	-8.3420E-11	298	1500
525	C6H10	1-METHYLCYCLOPENTENE	-29.473	4.9672E-01	-2.0380E-04	4.8087E-09	-----	298	1000
526	C6H10	3-METHYLCYCLOPENTENE	-43.229	5.7170E-01	-3.2845E-04	6.9601E-08	-----	298	1000
527	C6H10	4-METHYLCYCLOPENTENE	-41.176	5.6124E-01	-3.1389E-04	6.3170E-08	-----	298	1000
528	C6H10	CYCLOHEXENE	11.332	2.5648E-01	2.9121E-04	-4.0917E-07	1.2869E-10	100	1500
529	C6H10	2,3-DIMETHYL-1,3-BUTADIENE	-14.346	6.3345E-01	-5.7820E-04	2.9473E-07	-6.2408E-11	298	1500
530	C6H10	1,5-HEXADIENE	-19.919	5.8801E-01	-6.4657E-04	2.0423E-07	-3.8563E-11	298	1500
531	C6H10	cis,trans-2,4-HEXADIENE	-21.887	5.8531E-01	-4.4663E-04	1.8361E-07	-3.2586E-11	298	1500
532	C6H10	trans,trans-2,4-HEXADIENE	-13.866	5.8123E-01	-4.6720E-04	2.1027E-07	-4.0509E-11	298	1500
533	C6H10	1-HEXYNE	19.611	4.4045E-01	-2.3708E-04	4.1265E-08	3.5316E-12	200	1500
534	C6H10	2-HEXYNE	-3.658	5.1409E-01	-3.7142E-04	1.5649E-07	-2.7818E-11	298	1500
535	C6H10	3-HEXYNE	-12.209	5.5220E-01	-4.4735E-04	2.2254E-07	-4.7781E-11	298	1500
536	C6H10O	CYCLOHEXANONE	-12.337	4.0837E-01	1.0597E-04	-2.9616E-07	1.0088E-10	200	1500
537	C6H10O	MESITYL OXIDE	16.062	5.8779E-01	-6.0312E-04	4.4456E-07	-1.4943E-10	298	1000
538	C6H10O2	epsilon-CAPROLACTONE	-59.878	7.3431E-01	-4.1856E-04	9.0409E-08	3.2030E-12	298	1500
539	C6H10O2	ETHYL METHACRYLATE	-38.063	7.5789E-01	-6.5982E-04	3.0689E-07	-5.9646E-11	298	1500
540	C6H10O2	n-PROPYL ACRYLATE	-34.027	8.8100E-01	-9.6426E-04	5.6512E-07	-1.2909E-10	298	1500
541	C6H10O3	ETHYLACETOACETATE	-38.431	8.1942E-01	-7.5317E-04	3.7707E-07	-7.8132E-11	298	1500
542	C6H10O3	PROPIONIC ANHYDRIDE	29.000	3.6844E-01	3.0361E-04	-6.2082E-07	2.4092E-10	298	1200
543	C6H10O4	ADIPIC ACID	7.418	6.7710E-01	-4.6904E-04	1.4619E-07	-1.5583E-11	298	1500
544	C6H10O4	DIETHYL OXALATE	-63.195	1.0643E+00	-1.1909E-03	6.9357E-07	-1.5592E-10	298	1500
545	C6H10O4	ETHYLENE GLYCOL DIACETATE	-63.207	1.0644E+00	-1.1911E-03	6.9374E-07	-1.5597E-10	298	1500
546	C6H10O4	ETHYLIDENE DIACETATE	-11.375	5.4896E-01	3.3144E-04	-1.0756E-06	5.5152E-10	298	1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
547	C6H11N	HEXANENITRILE	23.213	4.6598E-01	-1.9041E-04	-8.6856E-09	1.7539E-11	200 1500
548	C6H11NO	epsilon-CAPROLACTAM	-10.914	2.7864E-01	6.5610E-04	-9.5916E-07	3.6689E-10	298 1000
549	C6H11NO	CYCLOHEXANONE OXIME	-38.514	6.5385E-01	-2.3559E-04	-7.2552E-08	4.5887E-11	298 1500
550	C6H12	CYCLOHEXANE	13.783	2.0742E-01	5.3682E-04	-6.3012E-07	1.8988E-10	100 1500
551	C6H12	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	32.307	4.2869E-01	-1.5601E-04	-2.1440E-08	1.8781E-11	200 1500
552	C6H12	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	50.138	1.9488E-01	3.1558E-04	-3.7082E-07	1.0920E-10	200 1500
553	C6H12	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	37.579	2.8542E-01	1.8034E-04	-3.0375E-07	9.8601E-11	200 1500
554	C6H12	2-ETHYL-1-BUTENE	26.884	3.9566E-01	-5.3867E-05	-1.1252E-07	4.5467E-11	200 1500
555	C6H12	trans-3-METHYL-2-PENTENE	-16.123	5.7438E-01	-3.4767E-04	8.6822E-08	-----	298 1000
556	C6H12	1-HEXENE	32.517	3.5231E-01	2.2971E-05	-1.6592E-07	5.8510E-11	200 1500
557	C6H12	cis-2-HEXENE	35.642	2.9178E-01	1.5778E-04	-2.7413E-07	8.8092E-11	200 1500
558	C6H12	trans-2-HEXENE	49.211	2.6046E-01	1.8185E-04	-2.8038E-07	8.7781E-11	200 1500
559	C6H12	cis-3-HEXENE	58.647	1.3967E-01	4.7553E-04	-5.3528E-07	1.6155E-10	150 1500
560	C6H12	trans-3-HEXENE	66.499	1.6110E-01	3.8543E-04	-4.4785E-07	1.3530E-10	150 1500
561	C6H12	METHYLCYCLOPENTANE	-9.939	4.2528E-01	1.2521E-05	-1.8864E-07	6.4751E-11	200 1500
562	C6H12	2-METHYL-1-PENTENE	35.161	3.5515E-01	1.6698E-05	-1.6387E-07	5.7999E-11	200 1500
563	C6H12	2-METHYL-2-PENTENE	27.059	3.4858E-01	4.7035E-05	-1.9000E-07	6.5743E-11	200 1500
564	C6H12	3-METHYL-1-PENTENE	59.573	2.5875E-01	1.8945E-04	-3.0001E-07	9.6074E-11	150 1500
565	C6H12	3-METHYL-cis-2-PENTENE	58.069	1.6574E-01	4.0178E-04	-4.6769E-07	1.4145E-10	150 1500
566	C6H12	4-METHYL-1-PENTENE	26.362	3.5120E-01	3.9961E-05	-1.8537E-07	6.4392E-11	200 1500
567	C6H12	4-METHYL-cis-2-PENTENE	52.969	2.5164E-01	2.0116E-04	-3.0068E-07	9.5720E-11	200 1500
568	C6H12	4-METHYL-trans-2-PENTENE	39.751	3.7243E-01	-5.1165E-05	-9.8996E-08	3.8818E-11	200 1500
569	C6H12N2	TRIETHYLENEDIAMINE	-124.418	1.0337E+00	-8.2395E-04	3.2203E-07	-4.8974E-11	298 1500
570	C6H12O	BUTYL VINYL ETHER	-1.119	5.8419E-01	-3.7075E-04	1.2882E-07	-2.3385E-11	298 1500
571	C6H12O	CYCLOHEXANOL	17.124	3.3700E-01	2.8176E-04	-4.2713E-07	1.3215E-10	200 1500
572	C6H12O	1-HEXANAL	71.773	2.0294E-01	3.4761E-04	-4.1609E-07	1.2259E-10	200 1500
573	C6H12O	ETHYL ISOPROPYL KETONE	36.515	3.4267E-01	1.4830E-04	-3.4209E-07	1.3148E-10	298 1200
574	C6H12O	2-HEXANONE	45.050	3.5513E-01	4.8896E-05	-1.9813E-07	6.4005E-11	200 1500
575	C6H12O	3-HEXANONE	73.031	2.2148E-01	2.7912E-04	-3.6876E-07	1.1286E-10	150 1500
576	C6H12O	METHYL ISOBUTYL KETONE	2.404	5.8495E-01	-3.7647E-04	1.2418E-07	-1.7051E-11	298 1500
577	C6H12O2	n-PENTYL FORMATE	-30.624	8.1555E-01	-7.4226E-04	3.7578E-07	-7.8511E-11	298 1500
578	C6H12O2	n-BUTYL ACETATE	85.139	7.1561E-02	8.7842E-04	-1.0725E-06	3.7362E-10	298 1200
579	C6H12O2	sec-BUTYL ACETATE	-37.391	8.3030E-01	-6.9627E-04	2.6603E-07	-2.1215E-11	298 1000
580	C6H12O2	tert-BUTYL ACETATE	-66.418	1.0291E+00	-1.1512E-03	7.0828E-07	-1.7774E-10	298 1200
581	C6H12O2	ETHYL n-BUTYRATE	-16.529	7.2624E-01	-5.1890E-04	1.2305E-07	2.3936E-11	298 1200
582	C6H12O2	ETHYL ISOBUTYRATE	-62.802	9.3400E-01	-9.1286E-04	4.8405E-07	-1.0440E-10	298 1500
583	C6H12O2	ISOBUTYL ACETATE	-24.628	7.5868E-01	-5.9783E-04	2.3506E-07	-3.4297E-11	298 1500
584	C6H12O2	n-PROPYL PROPIONATE	-26.162	7.8326E-01	-6.3633E-04	2.2535E-07	-8.0808E-12	298 1200
585	C6H12O2	CYCLOHEXYL PEROXIDE	-66.681	9.6297E-01	-1.0232E-03	7.4423E-07	-2.5645E-10	298 1000
586	C6H12O2	DIACETONE ALCOHOL	13.030	5.9591E-01	-3.8411E-04	1.5153E-07	-3.8398E-11	298 1200
587	C6H12O2	2-ETHYL BUTYRIC ACID	-44.341	8.5885E-01	-8.2522E-04	4.6805E-07	-1.1743E-10	298 1200
588	C6H12O2	n-HEXANOIC ACID	-9.559	7.4029E-01	-6.6784E-04	3.7713E-07	-1.0030E-10	298 1200
589	C6H12O3	2-ETHOXYETHYL ACETATE	-34.381	8.6550E-01	-7.7015E-04	3.7720E-07	-8.0618E-11	298 1500
590	C6H12O3	HYDROXYCAPROIC ACID	-2.103	7.3513E-01	-5.6705E-04	2.2007E-07	-3.6780E-11	298 1500
591	C6H12O3	PARALDEHYDE	-129.363	1.2890E+00	-1.4032E-03	7.4424E-07	-1.4315E-10	298 1500
592	C6H12O3	sec-BUTYL GLYCOLATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----
593	C6H12S	THIACYCLOHEPTANE	-70.538	7.2789E-01	-2.4125E-04	-4.9195E-08	-----	298 1000
594	C6H13N	CYCLOHEXYLAMINE	-47.225	7.0490E-01	-3.4142E-04	1.8298E-08	1.9665E-11	298 1500
595	C6H13N	HEXAMETHYLENEIMINE	-81.362	7.9390E-01	-4.5964E-04	9.4512E-08	2.5824E-12	298 1400
596	C6H14	2,2-DIMETHYLBUTANE	-1.477	5.5644E-01	-2.4802E-04	4.1433E-08	2.4035E-13	200 1500
597	C6H14	2,3-DIMETHYLBUTANE	-25.999	6.8344E-01	-4.8517E-04	2.1262E-07	-4.3837E-11	200 1500
598	C6H14	n-HEXANE	25.924	4.1927E-01	-1.2491E-05	-1.5916E-07	5.8784E-11	200 1500
599	C6H14	2-METHYLPENTANE	-7.197	6.0097E-01	-3.4094E-04	9.5210E-08	-1.0297E-11	200 1500
600	C6H14	3-METHYLPENTANE	-7.123	5.8327E-01	-3.0338E-04	6.8016E-08	-3.9778E-12	200 1500
601	C6H14N2O2	LYSINE	3.524	8.1910E-01	-6.3474E-04	2.7688E-07	-5.6094E-11	298 1500
602	C6H14O	2-ETHYL-1-BUTANOL	-25.284	7.6092E-01	-6.1315E-04	2.7815E-07	-5.3099E-11	298 1500
603	C6H14O	1-HEXANOL	10.719	5.5767E-01	-2.1818E-04	-3.2298E-08	2.9769E-11	200 1500
604	C6H14O	2-HEXANOL	-8.756	6.7929E-01	-4.4926E-04	1.4008E-07	-1.1453E-11	298 1200
605	C6H14O	2-METHYL-1-PENTANOL	-18.096	7.1113E-01	-5.2110E-04	2.1617E-07	-4.0923E-11	298 1500
606	C6H14O	4-METHYL-2-PENTANOL	-17.282	7.3333E-01	-5.6666E-04	2.4735E-07	-4.7894E-11	298 1500
607	C6H14O	n-BUTYL ETHYL ETHER	10.663	5.7291E-01	-2.7890E-04	3.8539E-08	6.0989E-12	298 1500
608	C6H14O	DIISOPROPYL ETHER	92.068	1.1054E-01	5.8784E-04	-6.1854E-07	1.7855E-10	100 1500
609	C6H14O	DI-n-PROPYL ETHER	-26.082	7.6707E-01	-6.4734E-04	3.3945E-07	-8.3996E-11	298 1200
610	C6H14O	METHYL tert-PENTYL ETHER	-5.816	6.8044E-01	-4.6708E-04	1.7397E-07	-2.8573E-11	298 1500
611	C6H14O2	ACETAL	31.834	3.4539E-01	5.6817E-04	-1.0268E-06	4.4628E-10	298 1000
612	C6H14O2	2-BUTOXYETHANOL	-22.219	8.1143E-01	-7.1242E-04	3.9347E-07	-1.0334E-10	298 1200
613	C6H14O2	1,6-HEXANEDIOL	-2.789	7.0351E-01	-4.9185E-04	1.8516E-07	-3.0221E-11	298 1500
614	C6H14O2	HEXYLENE GLYCOL	-30.746	8.8908E-01	-8.0455E-04	4.0021E-07	-8.2866E-11	298 1500
615	C6H14O2S	Di-n-PROPYL SULFONE	16.469	6.7237E-01	-3.3664E-04	5.5367E-08	4.0249E-12	298 1500
616	C6H14O3	DIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	-38.307	9.9161E-01	-1.1006E-03	7.7626E-07	-2.4078E-10	298 1200
617	C6H14O3	DIPROPYLENE GLYCOL	-31.988	9.4839E-01	-8.9835E-04	4.8010E-07	-1.1001E-10	298 1200
618	C6H14O3	2-(2-ETHOXYETHOXY)ETHANOL	-15.223	8.0630E-01	-6.0939E-04	2.4852E-07	-4.4531E-11	298 1500
619	C6H14O3	TRIMETHYLOLPROPANE	-14.530	8.3299E-01	-6.6014E-04	2.7694E-07	-4.8128E-11	298 1500
620	C6H14O4	TRIETHYLENE GLYCOL	2.101	7.8650E-01	-5.6060E-04	2.0905E-07	-3.3896E-11	298 1500
621	C6H14O6	SORBITOL	-6.695	1.0042E+00	-7.9252E-04	2.0507E-07	3.0979E-11	298 1200
622	C6H14S	n-HEXYLMERCAPTAN	56.097	3.5459E-01	1.3831E-04	-2.6776E-07	8.5007E-11	200 1500
623	C6H14S	BUTYL-ETHYL-SULFIDE	14.362	5.6756E-01	-2.6704E-04	4.2116E-08	-----	298 1000
624	C6H14S	ISOPROPYL-SULFIDE	-5.059	7.2542E-01	-5.1831E-04	1.5466E-07	-----	298 1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $(C_p - \text{joule/(mol K)}, T - K)$								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
625	C6H14S	METHYL-PENTYL-SULFIDE	17.152	5.6455E-01	-2.6040E-04	4.4321E-08	-----	298 1000
626	C6H14S	PROPYL-SULFIDE	16.912	5.4572E-01	-2.1603E-04	2.5860E-08	-----	298 1000
627	C6H14S2	PROPYL-DISULFIDE	22.739	6.4496E-01	-3.5881E-04	8.0986E-08	-----	298 1000
628	C6H15Al	TRIETHYL ALUMINUM	-----	-----	-----	-----	-----	-----
629	C6H15Al2Cl3	ETHYL ALUMINUM SESQUICHLORIDE	123.889	2.1683E-01	6.9390E-04	-8.2388E-07	2.5547E-10	100 1500
630	C6H15N	DIISOPROPYLAMINE	-38.690	8.3934E-01	-6.8079E-04	3.1403E-07	-6.5038E-11	298 1500
631	C6H15N	DI-n-PROPYLAMINE	-35.272	8.1873E-01	-6.6672E-04	3.1414E-07	-6.4824E-11	298 1500
632	C6H15N	n-HEXYLAMINE	62.901	3.0756E-01	2.3918E-04	-3.4644E-07	1.0365E-10	200 1500
633	C6H15N	TRIETHYLAMINE	55.793	3.3337E-01	2.2077E-04	-3.4942E-07	1.0838E-10	200 1500
634	C6H15NO	6-AMINOHEXANOL	10.049	6.6024E-01	-3.7498E-04	9.7671E-08	-1.2128E-11	298 1500
635	C6H15NO2	DIISOPROPANOLAMINE	-32.670	9.6179E-01	-8.5944E-04	4.1808E-07	-8.2801E-11	298 1200
636	C6H15NO3	TRIETHANOLAMINE	37.730	4.9155E-01	3.5952E-04	-8.2287E-07	3.5374E-10	298 1200
637	C6H15N3	N-AMINOETHYL PIPERAZINE	-18.325	7.9527E-01	-4.9153E-04	1.3652E-07	-1.2092E-11	298 1500
638	C6H15O4P	TRIETHYL PHOSPHATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----
639	C6H16N2	HEXAMETHYLENEDIAMINE	8.511	7.1350E-01	-4.7390E-04	2.1163E-07	-6.1825E-11	298 1200
640	C6H18N3OP	HEXAMETHYL PHOSPHORAMIDE	-----	-----	-----	-----	-----	-----
641	C6H18N4	TRITHYLENE TETRAMINE	-26.003	1.0161E+00	-8.1609E-04	3.6628E-07	-7.0398E-11	298 1500
642	C6H18OSi2	HEXAMETHYLDISILOXANE	96.759	5.3023E-01	-1.0701E-04	-1.0135E-07	4.3962E-11	200 1500
643	C6H18O3Si3	HEXAMETHYLCYCLOTRISILOXANE	42.372	7.1830E-01	-3.5419E-05	-3.1816E-07	1.2408E-10	100 1500
644	C6H19NSi2	HEXAMETHYLDISILAZANE	-10.219	8.5172E-01	-4.3504E-04	6.1843E-08	9.4823E-12	298 1500
645	C7H3ClF3NO2	4-CHLORO-3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	2.462	8.0944E-01	-8.0238E-04	3.9826E-07	-7.8100E-11	298 1600
646	C7H3Cl2F3	2,4-DICHLOROBENZOTRIFLUORIDE	-18.588	8.4436E-01	-8.9784E-04	4.7892E-07	-1.0373E-10	298 1200
647	C7H3Cl2NO	3,4-DICHLOROPHENYL ISOCYANATE	-88.252	1.2181E+00	-1.8543E-03	1.3889E-06	-3.9144E-10	298 1200
648	C7H4ClF3	p-CHLOROBENZOTRIFLUORIDE	-32.088	8.0944E-01	-8.0238E-04	3.9826E-07	-7.8100E-11	298 1600
649	C7H4Cl2O	m-CHLOROBENZOYL CHLORIDE	3.438	5.7712E-01	-4.8258E-04	2.0062E-07	-3.3551E-11	298 1500
650	C7H4F3NO2	3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	-16.178	8.0944E-01	-8.0238E-04	3.9826E-07	-7.8100E-11	298 1600
651	C7H5ClO	BENZOYL CHLORIDE	-8.923	5.4527E-01	-4.0749E-04	1.4722E-07	-2.0723E-11	298 1500
652	C7H5ClO2	o-CHLOROBENZOIC ACID	8.444	3.3784E-01	3.0050E-04	-6.8672E-07	3.0928E-10	298 1000
653	C7H5Cl3	BENZOTRICHLORIDE	-17.223	7.3674E-01	-7.4806E-04	4.2367E-07	-1.0609E-10	298 1200
654	C7H5F3	BENZOTRIFLUORIDE	-5.571	5.6388E-01	-3.3437E-04	5.2123E-08	1.1313E-11	200 1500
655	C7H5N	BENZONITRILE	-2.624	4.5843E-01	-2.6757E-04	4.3711E-08	7.3182E-12	200 1500
656	C7H5NO	PHENYL ISOCYANATE	-28.586	5.8118E-01	-4.2739E-04	1.4817E-07	-1.9292E-11	298 1500
657	C7H5N3O6	2,4,6-TRINITROTOLUENE	78.953	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
658	C7H6Cl2	BENZYL DICHLORIDE	-23.635	6.5729E-01	-5.5210E-04	2.3709E-07	-4.1699E-11	298 1500
659	C7H6Cl2	2,4-DICHLOROTOLUENE	37.983	2.1821E-01	7.2356E-04	-1.2976E-06	6.0155E-10	298 1000
660	C7H6N2O4	2,4-DINITROTOLUENE	44.603	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
661	C7H6N2O4	2,5-DINITROTOLUENE	44.603	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
662	C7H6N2O4	2,6-DINITROTOLUENE	44.603	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
663	C7H6N2O4	3,4-DINITROTOLUENE	44.603	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
664	C7H6N2O4	3,5-DINITROTOLUENE	44.603	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
665	C7H6O	BENZALDEHYDE	-0.890	4.4758E-01	-1.8566E-04	-3.6205E-08	3.1110E-11	200 1500
666	C7H6O2	BENZOIC ACID	16.158	2.8234E-01	1.7811E-04	-3.2176E-07	1.0752E-10	200 1500
667	C7H6O2	p-HYDROXYBENZALDEHYDE	-17.327	6.1293E-01	-3.6141E-04	4.2615E-08	1.8399E-11	298 1200
668	C7H6O2	SALICYLALDEHYDE	-33.117	7.0148E-01	-5.4741E-04	2.0112E-07	-2.8014E-11	298 1500
669	C7H6O3	SALICYLIC ACID	-4.230	4.2572E-01	1.4885E-04	-5.4965E-07	2.6161E-10	298 1000
670	C7H7Br	p-BROMOTOLUENE	-11.148	5.5111E-01	-3.6702E-04	1.0465E-07	-8.5052E-12	298 1500
671	C7H7Cl	BENZYL CHLORIDE	-20.027	5.0561E-01	-3.9247E-04	1.4825E-07	-2.1517E-11	200 1500
672	C7H7Cl	o-CHLOROTOLUENE	-19.597	5.4660E-01	-2.2561E-04	-1.3546E-07	1.0757E-10	298 1000
673	C7H7Cl	p-CHLOROTOLUENE	-19.597	5.4660E-01	-2.2561E-04	-1.3546E-07	1.0757E-10	298 1000
674	C7H7F	p-FLUOROTOLUENE	-33.607	6.2296E-01	-4.4225E-04	1.2414E-07	-----	298 1000
675	C7H7NO	FORMANILIDE	-58.019	7.4752E-01	-6.4061E-04	2.6844E-07	-4.4253E-11	298 1500
676	C7H7NO2	m-NITROTOLUENE	10.253	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
677	C7H7NO2	o-NITROTOLUENE	10.253	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
678	C7H7NO2	p-NITROTOLUENE	10.253	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
679	C7H7NO3	o-NITROANISOLE	-11.742	6.4927E-01	-4.3634E-04	1.1823E-07	-3.1868E-12	298 1200
680	C7H8	TOLUENE	-24.097	5.2187E-01	-2.9827E-04	6.1220E-08	1.2576E-12	200 1500
681	C7H8	1,3,5-CYCLOHEPTATRIENE	-42.702	6.8618E-01	-5.4743E-04	1.7426E-07	-----	298 1000
682	C7H8O	ANISOLE	-46.092	6.4927E-01	-4.3634E-04	1.1823E-07	-3.1868E-12	298 1200
683	C7H8O	BENZYL ALCOHOL	-38.244	5.7295E-01	-1.9618E-04	-1.7885E-07	1.2218E-10	298 1000
684	C7H8O	m-CRESOL	-28.118	6.6639E-01	-5.684E-04	2.4989E-07	-4.7599E-11	200 1500
685	C7H8O	o-CRESOL	-10.489	5.7475E-01	-3.8585E-04	1.1736E-07	-1.1385E-11	200 1500
686	C7H8O	p-CRESOL	-21.163	6.2005E-01	-4.6259E-04	1.7288E-07	-2.5755E-11	200 1500
687	C7H8O2	GUAICOL	-53.237	8.0557E-01	-7.1471E-04	3.1975E-07	-5.4471E-11	298 1200
688	C7H8O2	p-METHOXYPHENOL	-55.124	8.2278E-01	-7.6384E-04	3.7503E-07	-7.5815E-11	298 1500
689	C7H9N	BENZYLAMINE	-44.632	7.3792E-01	-6.4144E-04	3.0305E-07	-6.0296E-11	298 1500
690	C7H9N	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	-12.959	5.3389E-01	-2.5211E-04	1.2256E-08	1.5481E-11	200 1500
691	C7H9N	N-METHYLANILINE	-63.167	8.2599E-01	-7.5180E-04	3.5552E-07	-6.8719E-11	298 1500
692	C7H9N	m-TOLUIDINE	-15.216	5.9535E-01	-3.8755E-04	1.1831E-07	-1.2703E-11	200 1500
693	C7H9N	o-TOLUIDINE	-15.391	6.2396E-01	-4.3867E-04	1.5449E-07	-2.1698E-11	200 1500
694	C7H9N	p-TOLUIDINE	-18.360	6.1016E-01	-4.1260E-04	1.3537E-07	-1.6747E-11	200 1500
695	C7H10	2-NORBORNENE	-75.556	7.5963E-01	-5.2049E-04	1.6449E-07	-1.7953E-11	298 1500
696	C7H10N2	TOLUNEDIAMINE	-75.447	1.0663E+00	-1.1548E-03	6.1040E-07	-1.1054E-10	298 1500
697	C7H11NO	CYCLOHEXYL ISOCYANATE	-20.869	5.1917E-01	4.6475E-05	-2.9175E-07	1.0386E-10	298 1500
698	C7H12	1-HEPTYNE	10.606	5.6170E-01	-3.2726E-04	7.6638E-08	-----	298 1000
699	C7H12O2	n-BUTYL ACRYLATE	31.423	6.2124E-01	-3.6990E-04	1.0373E-07	-1.7445E-11	298 1000
700	C7H12O2	ISOBUTYL ACRYLATE	-39.964	9.9799E-01	-1.0514E-03	5.9928E-07	-1.3516E-10	298 1500
701	C7H12O2	n-PROPYL METHACRYLATE	-43.005	8.7703E-01	-7.6204E-04	3.5635E-07	-6.9619E-11	298 1500
702	C7H12O4	DIETHYL MALONATE	-85.174	1.2290E+00	-1.3284E-03	7.4897E-07	-1.6575E-10	298 1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
703	C7H14	CYCLOHEPTANE	9.447	3.5261E-01	3.7699E-04	-5.3869E-07	1.6956E-10	100	1500
704	C7H14	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	9.329	4.1173E-01	1.8706E-04	-3.7024E-07	1.2310E-10	200	1500
705	C7H14	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	10.096	4.1584E-01	1.6872E-04	-3.5294E-07	1.1818E-10	200	1500
706	C7H14	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	11.514	4.1203E-01	1.7044E-04	-3.5275E-07	1.1806E-10	200	1500
707	C7H14	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	11.486	4.1227E-01	1.6993E-04	-3.5235E-07	1.1795E-10	200	1500
708	C7H14	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	11.486	4.1227E-01	1.6993E-04	-3.5235E-07	1.1795E-10	200	1500
709	C7H14	ETHYLCYCLOPENTANE	-28.514	5.7607E-01	-9.4379E-05	-1.6445E-07	6.9435E-11	100	1500
710	C7H14	2-ETHYL-1-PENTENE	7.553	5.5924E-01	-1.9092E-04	-5.9654E-08	3.5819E-11	298	1500
711	C7H14	3-ETHYL-1-PENTENE	2.696	5.6924E-01	-1.9489E-04	-6.2627E-08	3.7450E-11	298	1500
712	C7H14	1-HEPTENE	40.754	3.9922E-01	5.3848E-05	-2.1599E-07	7.4482E-11	200	1500
713	C7H14	cis-2-HEPTENE	-7.099	5.9005E-01	-2.3765E-04	-2.1795E-08	2.4907E-11	200	1500
714	C7H14	trans-2-HEPTENE	22.872	4.6064E-01	-1.9919E-05	-1.7969E-07	6.6169E-11	150	1500
715	C7H14	cis-3-HEPTENE	-25.417	6.7669E-01	-3.7697E-04	7.3028E-08	1.3960E-12	200	1500
716	C7H14	trans-3-HEPTENE	1.557	5.6602E-01	-1.9660E-04	-5.5257E-08	3.4487E-11	150	1500
717	C7H14	METHYLCYCLOHEXANE	4.296	4.2716E-01	2.1058E-04	-3.9987E-07	1.3121E-10	200	1500
718	C7H14	2-METHYL-1-HEXENE	13.419	5.3960E-01	-1.7371E-04	-6.3050E-08	3.5189E-11	298	1500
719	C7H14	3-METHYL-1-HEXENE	2.696	5.6924E-01	-1.9489E-04	-6.2627E-08	3.7450E-11	298	1500
720	C7H14	4-METHYL-1-HEXENE	-21.774	7.0339E-01	-4.4459E-04	1.2769E-07	-1.3424E-11	150	1500
721	C7H14	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	0.695	6.0287E-01	-2.3415E-04	-4.8958E-08	3.6689E-11	298	1500
722	C7H14O	DIISOPROPYL KETONE	-59.457	8.9163E-01	-7.3368E-04	3.3507E-07	-6.4643E-11	298	1500
723	C7H14O	2-HEPTANONE	77.352	2.5355E-01	3.8252E-04	-4.9648E-07	1.4916E-10	150	1500
724	C7H14O	1-HEPTANAL	76.088	2.6868E-01	3.5354E-04	-4.5649E-07	1.3757E-10	200	1500
725	C7H14O	1-METHYLCYCLOHEXANOL	-54.565	8.4577E-01	-5.7323E-04	2.3275E-07	-5.9702E-11	298	1200
726	C7H14O	cis-2-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
727	C7H14O	trans-2-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
728	C7H14O	cis-3-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
729	C7H14O	trans-3-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
730	C7H14O	cis-4-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
731	C7H14O	trans-4-METHYLCYCLOHEXANOL	-47.283	7.6999E-01	-3.7628E-04	3.6819E-08	7.7738E-12	298	1200
732	C7H14O	5-METHYL-2-HEXANONE	-3.763	7.0117E-01	-4.7468E-04	1.8106E-07	-3.3882E-11	298	1200
733	C7H14O2	n-BUTYL PROPIONATE	-3.593	7.7324E-01	-5.9004E-04	2.9563E-07	-8.6992E-11	298	1200
734	C7H14O2	ETHYL ISOVALERATE	-45.699	9.9698E-01	-9.7130E-04	5.3585E-07	-1.2593E-10	298	1200
735	C7H14O2	ISOPENTYL ACETATE	-51.790	9.8897E-01	-9.0976E-04	4.6383E-07	-1.0053E-10	298	1500
736	C7H14O2	n-PENTYL ACETATE	-31.967	8.9188E-01	-7.5408E-04	3.6684E-07	-8.2457E-11	298	1200
737	C7H14O2	n-PROPYL n-BUTYRATE	-8.783	8.0270E-01	-6.4913E-04	3.4629E-07	-1.0270E-10	298	1200
738	C7H14O2	n-HEPTANOIC ACID	11.779	6.9196E-01	-4.1039E-04	1.1266E-07	-1.5295E-11	298	1500
739	C7H14O3	ETHYL-3-ETHOXYPROPIONATE	-62.701	1.1653E+00	-1.2886E-03	8.0077E-07	-2.0569E-10	298	1200
740	C7H15Br	1-BROMOHEPTANE	-11.271	7.7970E-01	-5.4848E-04	1.9542E-07	-2.5440E-11	298	1200
741	C7H15N	N-METHYLCYCLOHEXYLAMINE	-59.516	8.3575E-01	-4.3148E-04	4.6928E-08	1.6571E-11	298	1500
742	C7H16	2,2-DIMETHYLPENTANE	-19.277	7.6888E-01	-5.1678E-04	2.0476E-07	-3.7168E-11	200	1500
743	C7H16	2,3-DIMETHYLPENTANE	38.654	3.7259E-01	2.7632E-04	-4.3148E-07	1.3811E-10	100	1500
744	C7H16	2,4-DIMETHYLPENTANE	-32.996	8.7352E-01	-7.3286E-04	3.6633E-07	-7.9787E-11	200	1500
745	C7H16	3,3-DIMETHYLPENTANE	-23.909	7.8329E-01	-5.3992E-04	2.2604E-07	-4.4324E-11	200	1500
746	C7H16	3-ETHYLPENTANE	19.245	5.5072E-01	-1.4055E-04	-8.2482E-08	3.9487E-11	200	1500
747	C7H16	n-HEPTANE	26.984	5.0387E-01	-4.4748E-05	-1.6835E-07	6.5183E-11	200	1500
748	C7H16	2-METHYLBEXANE	-3.249	6.6625E-01	-3.3836E-04	6.0489E-08	2.5385E-12	200	1500
749	C7H16	3-METHYLBEXANE	-12.841	7.1358E-01	-4.2021E-04	1.1997E-07	-1.2906E-11	200	1500
750	C7H16	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	-21.150	7.4663E-01	-4.6699E-04	1.7923E-07	-3.4265E-11	200	1500
751	C7H16O	1-HEPTANOL	11.810	6.4236E-01	-2.4939E-04	-4.3649E-08	3.7035E-11	200	1500
752	C7H16O	2-HEPTANOL	-28.784	8.8407E-01	-7.1442E-04	3.2639E-07	-6.5218E-11	298	1500
753	C7H16O	5-METHYL-1-HEXANOL	0.274	6.8732E-01	-3.1154E-04	-1.1838E-08	3.5683E-11	298	1200
754	C7H16O	ISOPROPYL-TERT-BUTYL-ETHER	20.789	6.1547E-01	-2.6674E-04	3.0050E-08	-----	298	1000
755	C7H16S	n-HEPTYL MERCAPTAN	59.314	4.3814E-01	8.8964E-05	-2.6174E-07	8.7398E-11	200	1500
756	C7H16S	BUTYL-PROPYL-SULFIDE	15.543	6.4304E-01	-2.7440E-04	3.9835E-08	-----	298	1000
757	C7H16S	ETHYL-PENTYL-SULFIDE	13.355	6.6304E-01	-3.1221E-04	5.4413E-08	-----	298	1000
758	C7H16S	HEXYL-METHYL-SULFIDE	16.143	6.6003E-01	-3.1560E-04	5.6630E-08	-----	298	1000
759	C7H17N	1-AMINOHEPTANE	-1.435	7.4857E-01	-4.4543E-04	1.3200E-07	-1.8684E-11	298	1500
760	C8H4Cl2O2	ISOPHTHALOYL CHLORIDE	32.762	5.2222E-01	-3.3597E-04	9.0843E-08	-9.2349E-12	298	1200
761	C8H4O3	PHTHALIC ANHYDRIDE	40.083	3.6084E-02	9.5956E-04	-1.2341E-06	4.6597E-10	298	1000
762	C8H6	ETHYNYLBENZENE	-38.345	6.5890E-01	-5.3689E-04	1.7236E-07	-----	298	1000
763	C8H6O4	ISOPHTHALIC ACID	-48.374	6.9316E-01	-4.1468E-04	7.2676E-08	8.1593E-12	298	1500
764	C8H6O4	PHTHALIC ACID	-48.374	6.9316E-01	-4.1468E-04	7.2676E-08	8.1593E-12	298	1500
765	C8H6O4	TEREPHTHALIC ACID	-48.374	6.9316E-01	-4.1468E-04	7.2676E-08	8.1593E-12	298	1500
766	C8H6S	BENZOTHIOPHENE	-47.900	8.1457E-01	-8.0881E-04	4.1421E-07	-8.5298E-11	298	1500
767	C8H7N	INDOLE	-46.384	7.0422E-01	-5.3462E-04	1.9548E-07	-2.7036E-11	200	1500
768	C8H8	STYRENE	71.201	5.4767E-02	6.4793E-04	-6.9875E-07	2.1232E-10	100	1500
769	C8H8	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE	-41.686	6.8467E-01	-4.9986E-04	1.4494E-07	-----	298	1000
770	C8H8O	ACETOPHENONE	-44.384	6.3161E-01	-3.8644E-04	9.1755E-08	-2.9424E-12	298	1500
771	C8H8O	p-TOLUALDEHYDE	-34.314	6.9270E-01	-5.3448E-04	1.9482E-07	-1.6767E-11	298	1200
772	C8H8O2	METHYL BENZOATE	-44.363	6.6062E-01	-3.0730E-04	-7.6698E-08	7.8555E-11	298	1200
773	C8H8O2	o-TOLUIC ACID	5.831	3.2470E-01	4.8726E-04	-8.7808E-07	3.7290E-10	298	1000
774	C8H8O2	p-TOLUIC ACID	5.831	3.2470E-01	4.8726E-04	-8.7808E-07	3.7290E-10	298	1000
775	C8H8O3	METHYL SALICYLATE	-64.438	9.2054E-01	-8.6046E-04	4.1813E-07	-8.1500E-11	298	1500
776	C8H8O3	VANILLIN	-24.141	7.6542E-01	-4.9618E-04	1.3823E-07	-1.9509E-11	298	1200
777	C8H9NO	ACETANILIDE	-52.405	7.8304E-01	-5.9239E-04	2.3324E-07	-4.1725E-11	298	1500
778	C8H10	ETHYLBENZENE	-20.527	5.9578E-01	-3.0849E-04	3.5621E-08	1.2409E-11	200	1500
779	C8H10	m-XYLENE	-16.725	5.6424E-01	-2.6465E-04	1.3381E-08	1.5869E-11	200	1500
780	C8H10	o-XYLENE	0.182	5.1344E-01	-2.0212E-04	-2.1615E-08	2.3212E-11	200	1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - Joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
781	C8H10	p-XYLENE	-17.360	5.6470E-01	-2.6293E-04	1.1217E-08	1.6544E-11	200	1500
782	C8H10O	m-ETHYLPHENOL	17.179	5.1321E-01	-1.5178E-04	-9.7687E-08	5.1382E-11	200	1500
783	C8H10O	p-ETHYLPHENOL	17.179	5.1321E-01	-1.5178E-04	-9.7687E-08	5.1382E-11	200	1500
784	C8H10O	PHENETOLE	-70.622	8.7227E-01	-7.3933E-04	3.3808E-07	-6.7682E-11	298	1500
785	C8H10O	2-PHENYLETHANOL	-41.581	7.7144E-01	-6.0352E-04	2.4945E-07	-4.5938E-11	298	1500
786	C8H10O	2,3-XYLENOL	5.637	6.6110E-01	-4.6084E-04	1.6135E-07	-2.2812E-11	200	1500
787	C8H10O	2,4-XYLENOL	-6.981	6.8005E-01	-4.6398E-04	1.5240E-07	-1.8683E-11	200	1500
788	C8H10O	2,5-XYLENOL	-0.097	6.4699E-01	-4.0504E-04	1.0860E-07	-7.1789E-12	200	1500
789	C8H10O	2,6-XYLENOL	-3.351	6.5837E-01	-4.2958E-04	1.3046E-07	-1.3721E-11	200	1500
790	C8H10O	3,4-XYLENOL	-5.010	7.1824E-01	-5.6191E-04	2.3462E-07	-4.1599E-11	200	1500
791	C8H10O	3,5-XYLENOL	-14.573	6.9845E-01	-4.8247E-04	1.6146E-07	-2.0501E-11	200	1500
792	C8H11N	N,N-DIMETHYLANILINE	-80.587	9.3415E-01	-7.6870E-04	3.2262E-07	-5.7595E-11	298	1500
793	C8H11N	o-ETHYLANILINE	-44.119	8.6260E-01	-7.5428E-04	3.5713E-07	-7.2513E-11	298	1500
794	C8H11N	2,4,6-TRIMETHYLPYRIDINE	-44.959	7.5625E-01	-4.7616E-04	1.2070E-07	-5.5157E-12	298	1500
795	C8H11NO	p-PHENETIDINE	-61.255	9.5389E-01	-8.2789E-04	3.7816E-07	-7.4127E-11	298	1500
796	C8H12	1,5-CYCLOOCTADIENE	4.987	4.2829E-01	1.9618E-04	-4.0302E-07	1.3486E-10	100	1500
797	C8H12	VINYL CYCLOHEXENE	-85.630	9.7156E-01	-8.6793E-04	4.1915E-07	-8.4485E-11	298	1500
798	C8H12O4	1,4-CYCLOHEXANEDICARBOXYLIC ACID	-95.482	1.1417E+00	-9.0210E-04	3.5790E-07	-6.0891E-11	298	1200
799	C8H12O4	DIETHYL MALEATE	-89.669	1.5506E+00	-2.0466E-03	1.3800E-06	-3.5435E-10	298	1200
800	C8H14O2	n-BUTYL METHACRYLATE	-51.893	1.0235E+00	-9.3080E-04	4.7360E-07	-1.0396E-10	298	1200
801	C8H14O3	BUTYRIC ANHYDRIDE	29.745	7.9376E-01	-4.1894E-04	8.7715E-08	-5.9476E-12	298	1200
802	C8H14O4	DIETHYL SUCCINATE	-50.188	1.2234E+00	-1.2888E-03	7.3303E-07	-1.6796E-10	298	1500
803	C8H16	CYCLOOCTANE	-96.998	9.5483E-01	-5.7940E-04	1.3566E-07	-----	298	1000
804	C8H16	1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	12.609	4.3616E-01	3.5994E-04	-5.5592E-07	1.7723E-10	200	1500
805	C8H16	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	12.356	4.6185E-01	2.8460E-04	-4.9224E-07	1.6009E-10	200	1500
806	C8H16	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	5.195	5.1990E-01	1.7366E-04	-4.0995E-07	1.3877E-10	200	1500
807	C8H16	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	16.162	4.4120E-01	3.2552E-04	-5.2079E-07	1.6880E-10	200	1500
808	C8H16	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	17.334	4.4313E-01	3.0406E-04	-5.0089E-07	1.6161E-10	200	1500
809	C8H16	cis-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	17.334	4.4313E-01	3.0406E-04	-5.0089E-07	1.6161E-10	200	1500
810	C8H16	trans-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	7.358	4.9586E-01	2.2944E-04	-4.5522E-07	1.5104E-10	200	1500
811	C8H16	ETHYLCYCLOHEXANE	9.711	4.9505E-01	2.0606E-04	-4.2645E-07	1.4166E-10	200	1500
812	C8H16	2-ETHYL-1-HEXENE	-24.228	8.3947E-01	-6.1664E-04	2.4854E-07	-4.3134E-11	298	1500
813	C8H16	1-METHYL-1-ETHYLCYCLOPENTANE	-69.713	9.2602E-01	-6.2526E-04	2.0490E-07	-2.4889E-11	298	1500
814	C8H16	1-OCTENE	56.266	4.0665E-01	1.5805E-04	-3.2277E-07	1.0600E-10	200	1500
815	C8H16	trans-2-OCTENE	6.815	6.4056E-01	-2.3322E-04	-4.6067E-08	3.3079E-11	200	1500
816	C8H16	trans-3-OCTENE	-5.979	6.9800E-01	-3.1979E-04	9.4308E-09	1.9956E-11	200	1500
817	C8H16	trans-4-OCTENE	-5.979	6.9800E-01	-3.1979E-04	9.4308E-09	1.9956E-11	200	1500
818	C8H16	n-PROPYLCYCLOPENTANE	-51.866	7.8827E-01	-3.5255E-04	-6.8545E-09	3.1314E-11	100	1500
819	C8H16	2,4,4-TRIMETHYL-1-PENTENE	-28.020	8.6749E-01	-6.3580E-04	2.4452E-07	-3.9076E-11	298	1500
820	C8H16	2,4,4-TRIMETHYL-2-PENTENE	-23.378	8.4303E-01	-6.1037E-04	2.3775E-07	-3.9769E-11	298	1500
821	C8H16O	2-ETHYLHEXANAL	-30.667	8.9033E-01	-6.5620E-04	2.6358E-07	-4.4888E-11	298	1500
822	C8H16O	1-OCTANAL	85.407	3.0880E-01	4.0878E-04	-5.4231E-07	1.6932E-10	200	1500
823	C8H16O	2-OCTANONE	81.259	3.2148E-01	3.8818E-04	-5.4646E-07	1.7288E-10	150	1500
824	C8H16O2	n-BUTYL n-BUTYRATE	14.674	7.8762E-01	-3.9225E-04	4.2787E-08	1.5217E-11	298	1200
825	C8H16O2	n-HEXYL ACETATE	-46.949	1.0667E+00	-9.5577E-04	4.7655E-07	-9.8701E-11	298	1500
826	C8H16O2	ISOBUTYL ISOBUTYRATE	-78.711	1.1911E+00	-1.1320E-03	5.8376E-07	-1.2228E-10	298	1500
827	C8H16O2	n-OCTANOIC ACID	-20.242	9.9093E-01	-9.2370E-04	5.5027E-07	-1.5434E-10	298	1000
828	C8H16O4	DIETHYLENE GLYCOL ETHYL ETHER ACETATE	-51.637	1.1924E+00	-1.0849E-03	5.3285E-07	-1.0908E-10	298	1500
829	C8H18	2,2-DIMETHYLHEXANE	-9.102	7.9198E-01	-4.3438E-04	1.1094E-07	-9.1975E-12	200	1500
830	C8H18	2,3-DIMETHYLHEXANE	-45.246	9.7125E-01	-7.6224E-04	3.4891E-07	-7.0688E-11	200	1500
831	C8H18	2,4-DIMETHYLHEXANE	-35.844	9.7252E-01	-7.9337E-04	3.8126E-07	-8.0700E-11	200	1500
832	C8H18	2,5-DIMETHYLHEXANE	-32.363	9.0722E-01	-6.5105E-04	2.6842E-07	-4.9960E-11	200	1500
833	C8H18	3,3-DIMETHYLHEXANE	-37.306	9.6180E-01	-7.3386E-04	3.2761E-07	-6.5298E-11	200	1500
834	C8H18	3,4-DIMETHYLHEXANE	-59.720	1.0415E+00	-8.8492E-04	4.3894E-07	-9.4154E-11	200	1500
835	C8H18	3-ETHYLHEXANE	16.214	6.6412E-01	-2.2656E-04	-5.1790E-08	3.5344E-11	200	1500
836	C8H18	3-ETHYL-2-METHYLPENTANE	-7.477	7.7747E-01	-4.2844E-04	9.1763E-08	-----	298	1000
837	C8H18	3-METHYL-3-ETHYLPENTANE	12.976	6.4949E-01	-1.3948E-04	-1.2724E-07	5.6504E-11	150	1500
838	C8H18	2-METHYLHEPTANE	-3.367	7.5824E-01	-3.8216E-04	5.7358E-08	8.0178E-12	200	1500
839	C8H18	3-METHYLHEPTANE	-10.106	7.8711E-01	-4.3415E-04	9.7487E-08	-2.9023E-12	200	1500
840	C8H18	4-METHYLHEPTANE	-17.581	8.3526E-01	-5.1418E-04	1.5104E-07	-1.5855E-11	200	1500
841	C8H18	n-OCTANE	29.053	5.8016E-01	-5.7103E-05	-1.9548E-07	7.6614E-11	200	1500
842	C8H18	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	-48.847	9.9777E-01	-8.0693E-04	3.9894E-07	-8.7211E-11	200	1500
843	C8H18	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	-21.703	8.5849E-01	-5.5323E-04	2.0892E-07	-3.7285E-11	200	1500
844	C8H18	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	-51.678	1.0143E+00	-8.2601E-04	4.0855E-07	-8.9531E-11	200	1500
845	C8H18	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	-53.615	1.0646E+00	-9.6734E-04	5.2516E-07	-1.2149E-10	200	1500
846	C8H18	2,2,3,3-TETRAMETHYLBUTANE	-44.660	9.7893E-01	-6.7032E-04	1.8192E-07	-----	298	1000
847	C8H18O	Di-n-BUTYL ETHER	86.995	3.4274E-01	3.7493E-04	-5.7832E-07	1.8911E-10	200	1500
848	C8H18O	Di-sec-BUTYL ETHER	-50.577	1.1014E+00	-9.9402E-04	5.1326E-07	-1.1304E-10	298	1200
849	C8H18O	Di-tert-BUTYL ETHER	122.563	1.7324E-01	6.4796E-04	-6.9227E-07	2.0237E-10	200	1500
850	C8H18O	2-ETHYL-1-HEXANOL	-8.577	8.3851E-01	-5.0979E-04	1.4511E-07	-1.4766E-11	298	1500
851	C8H18O	1-OCTANOL	13.196	7.2493E-01	-2.7623E-04	-5.8380E-08	4.5179E-11	200	1500
852	C8H18O	2-OCTANOL	-23.930	9.4474E-01	-7.0058E-04	2.8277E-07	-4.9163E-11	298	1500
853	C8H18O2	Di-t-BUTYL PEROXIDE	-5.907	9.4614E-01	-6.7505E-04	2.4895E-07	-3.9188E-11	298	1500
854	C8H18O2S	Di-n-BUTYL SULFONE	6.590	9.1442E-01	-5.5866E-04	1.7288E-07	-1.9647E-11	298	1500
855	C8H18O3	DIETHYLENE GLYCOL DIETHYL ETHER	-31.678	1.0594E+00	-8.1318E-04	3.3723E-07	-6.1289E-11	298	1500
856	C8H18O3	DIETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER	-15.996	9.8794E-01	-6.9921E-04	2.5671E-07	-4.0681E-11	298	1500
857	C8H18O4	TRIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	-15.847	1.0394E+00	-7.4905E-04	2.8115E-07	-4.5915E-11	298	1500
858	C8H18O5	TETRAETHYLENE GLYCOL	7.854	1.0016E+00	-7.0468E-04	2.6794E-07	-4.8409E-11	298	1200

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
859	C8H18S	n-OCTYL MERCAPTAN	63.070	4.9322E-01	1.4077E-04	-3.4436E-07	1.1448E-10	200 1500
860	C8H18S	tert-OCTYL MERCAPTAN	-27.449	1.0002E+00	-7.2696E-04	2.4916E-07	-3.1819E-11	298 1500
861	C8H18S	BUTYL-SULFIDE	14.557	7.3839E-01	-3.2937E-04	5.2028E-08	-----	298 1000
862	C8H18S	ETHYL-HEXYL-SULFIDE	12.005	7.6027E-01	-3.7040E-04	6.8300E-08	-----	298 1000
863	C8H18S	HEPTYL-METHYL-SULFIDE	14.798	7.5722E-01	-3.7374E-04	7.0492E-08	-----	298 1000
864	C8H18S	PENTYL-PROPYL-SULFIDE	14.557	7.3839E-01	-3.2937E-04	5.2028E-08	-----	298 1000
865	C8H18S2	BUTYL-DISULFIDE	20.391	8.3760E-01	-4.7208E-04	1.0713E-07	-----	298 1000
866	C8H19N	Di-n-BUTYLAMINE	-36.248	1.0025E+00	-7.6232E-04	3.2620E-07	-6.0071E-11	298 1500
867	C8H19N	DIISOBUTYLAMINE	-37.761	9.8864E-01	-6.9887E-04	2.6003E-07	-4.1045E-11	298 1500
868	C8H19N	n-OCTYLAMINE	-11.736	9.0057E-01	-6.1188E-04	2.2599E-07	-3.5786E-11	298 1500
869	C8H23N5	TETRAETHYLENEPENTAMINE	-49.208	1.3828E+00	-1.1462E-03	5.2201E-07	-1.0064E-10	298 1500
870	C8H24O4Si4	OCTAMETHYLCYCLOTETRAILOXANE	-10.762	1.3722E+00	-8.6662E-04	2.2799E-07	-1.4708E-11	298 1500
871	C9H4O5	TRIMELLITIC ANHYDRIDE	-13.209	5.6342E-01	1.4947E-05	-4.4215E-07	2.1578E-10	298 1000
872	C9H6N2O2	TOLUENE DIISOCYANATE	-5.078	5.7582E-01	2.9402E-04	-9.0683E-07	4.3055E-10	298 1000
873	C9H7N	ISOQUINOLINE	-18.255	5.8698E-01	-2.5163E-04	-4.1653E-08	3.9647E-11	200 1500
874	C9H7N	QUINOLINE	-21.558	6.0838E-01	-2.9061E-04	-1.2260E-08	3.1722E-11	200 1500
875	C9H7NO	8-HYDROXYQUINOLINE	-62.510	9.7219E-01	-9.3439E-04	4.4959E-07	-8.6601E-11	298 1500
876	C9H8	INDENE	-31.858	6.2986E-01	-3.6332E-04	6.8279E-08	4.9422E-12	200 1500
877	C9H8O	2-METHYLBENZOFURAN	-59.800	8.8351E-01	-8.0230E-04	3.7939E-07	-7.2950E-11	298 1500
878	C9H10	INDANE	-132.570	1.1568E+00	-1.2134E-03	6.6759E-07	-1.4627E-10	298 1500
879	C9H10	cis-PROPENYLBENZENE	-24.332	6.9287E-01	-4.5279E-04	1.1806E-07	-----	298 1000
880	C9H10	trans-PROPENYLBENZENE	-29.349	7.2308E-01	-4.9300E-04	1.3395E-07	-----	298 1000
881	C9H10	alpha-METHYLSTYRENE	24.923	4.3818E-01	-1.3764E-05	-1.8472E-07	7.0450E-11	200 1500
882	C9H10	m-METHYLSTYRENE	25.882	4.3319E-01	-5.1049E-06	-1.9087E-07	7.1985E-11	200 1500
883	C9H10	o-METHYLSTYRENE	25.882	4.3319E-01	-5.1049E-06	-1.9087E-07	7.1985E-11	200 1500
884	C9H10	p-METHYLSTYRENE	25.882	4.3319E-01	-5.1049E-06	-1.9087E-07	7.1985E-11	200 1500
885	C9H10O2	BENZYL ACETATE	-64.296	9.7745E-01	-8.0623E-04	2.7233E-07	-1.0633E-12	298 1200
886	C9H10O2	ETHYL BENZOATE	-91.208	1.0326E+00	-9.5250E-04	4.6492E-07	-9.0498E-11	298 1500
887	C9H10O3	ETHYL VANILLIN	-34.060	9.0152E-01	-6.1072E-04	1.8656E-07	-2.7428E-11	298 1200
888	C9H11NO	p-DIMETHYLAMINO BENZALDEHYDE	-65.931	9.6897E-01	-6.6584E-04	1.8803E-07	-1.2951E-11	298 1500
889	C9H12	CUMENE	10.149	5.1138E-01	-1.7703E-05	-2.2612E-07	8.8002E-11	200 1500
890	C9H12	m-ETHYLTOLUENE	-7.269	5.9696E-01	-2.0235E-04	-6.2005E-08	3.8692E-11	200 1500
891	C9H12	o-ETHYLTOLUENE	8.688	5.5216E-01	-1.5746E-04	-7.9142E-08	4.0458E-11	200 1500
892	C9H12	p-ETHYLTOLUENE	-13.082	6.3055E-01	-2.5570E-04	-2.7145E-08	3.0472E-11	200 1500
893	C9H12	MESITYLENE	-8.737	6.0394E-01	-2.3025E-04	-3.1411E-08	2.8748E-11	200 1500
894	C9H12	n-PROPYLBENZENE	-10.933	6.4349E-01	-2.7829E-04	-1.4431E-08	2.8143E-11	200 1500
895	C9H12	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	12.802	5.5862E-01	-1.9088E-04	-4.5260E-08	2.9986E-11	200 1500
896	C9H12	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE	7.238	5.5929E-01	-1.7851E-04	-5.9043E-08	3.4337E-11	200 1500
897	C9H12O	BENZYL ETHYL ETHER	-77.310	9.9168E-01	-8.2953E-04	3.7784E-07	-7.6033E-11	298 1500
898	C9H12O	2-PHENYL-2-PROPANOL	-42.729	8.6797E-01	-6.3040E-04	2.1037E-07	-2.1293E-11	298 1200
899	C9H12O2	CUMENE HYDROPEROXIDE	-42.988	9.9727E-01	-9.1932E-04	4.9051E-07	-1.1852E-10	298 1200
900	C9H14O	ISOPHORONE	-74.479	1.1286E+00	-1.0642E-03	5.8129E-07	-1.4417E-10	298 1200
901	C9H14O6	GLYCERYL TRIACETATE	-94.112	1.5807E+00	-1.7308E-03	9.5867E-07	-2.0165E-10	298 1200
902	C9H16	1-NONYNE	7.735	7.5747E-01	-4.4627E-04	1.0602E-07	-----	298 1000
903	C9H16O4	AZELAIC ACID	-10.832	1.1553E+00	-1.1558E-03	7.2207E-07	-2.0666E-10	298 1200
904	C9H18	BUTYLCYCLOPENTANE	-116.725	1.3097E+00	-1.2439E-03	5.2915E-07	-----	298 1000
905	C9H18	cis,cis-1,3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE	-59.731	9.2906E-01	-4.4221E-04	5.4375E-08	-----	298 1000
906	C9H18	cis,trans-1,3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE	-61.237	9.4713E-01	-4.9400E-04	8.2170E-08	-----	298 1000
907	C9H18	ISOPROPYLCYCLOHEXANE	-72.808	1.0165E+00	-6.2550E-04	1.7248E-07	-1.4751E-11	298 1500
908	C9H18	1-NONENE	55.655	4.9879E-01	1.0927E-04	-3.1474E-07	1.0691E-10	200 1500
909	C9H18	n-PROPYLCYCLOHEXANE	25.567	5.2828E-01	2.3719E-04	-4.6758E-07	1.5413E-10	200 1500
910	C9H18O	DIISOBUTYL KETONE	-1.433	8.8406E-01	-5.7459E-04	1.9432E-07	-2.8451E-11	298 1500
911	C9H18O	1-NONANAL	84.758	3.9995E-01	3.6567E-04	-5.3736E-07	1.6751E-10	200 1500
912	C9H18O2	n-BUTYL VALERATE	-43.663	1.1626E+00	-1.0255E-03	5.0332E-07	-1.0407E-10	298 1500
913	C9H18O2	n-NONANOIC ACID	16.182	8.4306E-01	-4.3510E-04	6.1835E-08	7.4964E-12	298 1200
914	C9H18O2	n-OCTYL FORMATE	-38.335	1.1242E+00	-9.4618E-04	4.4200E-07	-8.6768E-11	298 1500
915	C9H20	3,3-DIETHYLPENTANE	37.793	6.5813E-01	-9.9686E-05	-1.5751E-07	6.2352E-11	150 1500
916	C9H20	2,2-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	24.550	6.2909E-01	3.7947E-05	-2.9127E-07	1.0305E-10	150 1500
917	C9H20	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLPENTANE	-58.911	1.0983E+00	-7.6517E-04	2.1671E-07	-----	298 1000
918	C9H20	2,4-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	6.652	7.6279E-01	-2.3975E-04	-7.9564E-08	4.7011E-11	150 1500
919	C9H20	2,2-DIMETHYLHEPTANE	43.712	5.7185E-01	1.2970E-04	-3.6900E-07	1.2607E-10	150 1500
920	C9H20	2,6-DIMETHYLHEPTANE	15.557	7.2025E-01	-1.4814E-04	-1.6638E-07	7.3518E-11	150 1500
921	C9H20	3-ETHYLHEPTANE	68.581	4.4754E-01	3.1908E-04	-5.1182E-07	1.6482E-10	150 1500
922	C9H20	4-ETHYLHEPTANE	-27.273	9.4692E-01	-5.7145E-04	1.3701E-07	-----	298 1000
923	C9H20	2,3-DIMETHYLHEPTANE	-21.292	9.3010E-01	-5.5350E-04	1.3021E-07	-----	298 1000
924	C9H20	2,4-DIMETHYLHEPTANE	-35.993	9.7910E-01	-6.0785E-04	1.5039E-07	-----	298 1000
925	C9H20	2,5-DIMETHYLHEPTANE	-35.993	9.7910E-01	-6.0785E-04	1.5039E-07	-----	298 1000
926	C9H20	3,4-DIMETHYLHEPTANE	-36.744	9.8328E-01	-6.1576E-04	1.5475E-07	-----	298 1000
927	C9H20	3,5-DIMETHYLHEPTANE	-51.426	1.0322E+00	-6.6990E-04	1.7483E-07	-----	298 1000
928	C9H20	4,4-DIMETHYLHEPTANE	-34.003	1.0088E+00	-6.5873E-04	1.7450E-07	-----	298 1000
929	C9H20	3-ETHYL-2-METHYLHEXANE	-36.744	9.8328E-01	-6.1576E-04	1.5475E-07	-----	298 1000
930	C9H20	4-ETHYL-2-METHYLHEXANE	-51.426	1.0322E+00	-6.6990E-04	1.7483E-07	-----	298 1000
931	C9H20	3-ETHYL-3-METHYLHEXANE	-49.447	1.0620E+00	-7.2095E-04	1.9902E-07	-----	298 1000
932	C9H20	3-ETHYL-4-METHYLHEXANE	-52.162	1.0363E+00	-6.7772E-04	1.7914E-07	-----	298 1000
933	C9H20	2,2,3-TRIMETHYLHEXANE	-43.468	1.0452E+00	-7.0300E-04	1.9221E-07	-----	298 1000
934	C9H20	2,2,4-TRIMETHYLHEXANE	-58.158	1.0941E+00	-7.5722E-04	2.1235E-07	-----	298 1000
935	C9H20	2,3,3-TRIMETHYLHEXANE	-43.468	1.0452E+00	-7.0300E-04	1.9221E-07	-----	298 1000
936	C9H20	2,3,4-TRIMETHYLHEXANE	-46.166	1.0193E+00	-6.5965E-04	1.7226E-07	-----	298 1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $(C_p - \text{joule}/(\text{mol K}), T - \text{K})$									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
937	C9H20	2,3,5-TRIMETHYLHEXANE	-45.422	1.0152E+00	-6.5174E-04	1.6792E-07	-----	298	1000
938	C9H20	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	-58.158	1.0941E+00	-7.5722E-04	2.1235E-07	-----	298	1000
939	C9H20	3,3,4-TRIMETHYLHEXANE	-58.911	1.0983E+00	-7.6517E-04	2.1671E-07	-----	298	1000
940	C9H20	2-METHYLOCTANE	51.299	5.3562E-01	1.6961E-04	-4.0233E-07	1.3567E-10	150	1500
941	C9H20	3-METHYLOCTANE	43.182	5.7408E-01	1.0042E-04	-3.4988E-07	1.2161E-10	150	1500
942	C9H20	4-METHYLOCTANE	37.821	6.1030E-01	3.4470E-05	-3.0208E-07	1.0936E-10	150	1500
943	C9H20	n-NONANE	29.687	6.6821E-01	-9.6492E-05	-2.0014E-07	8.2200E-11	200	1500
944	C9H20	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	-56.144	1.1449E+00	-9.5333E-04	4.9493E-07	-1.1283E-10	200	1500
945	C9H20	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	-6.361	8.2329E-01	-3.2768E-04	-3.3527E-09	2.4144E-11	150	1500
946	C9H20	2,2,4,4-TETRAMETHYLPENTANE	45.985	5.7438E-01	1.1062E-04	-3.1707E-07	1.0496E-10	150	1500
947	C9H20	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	-52.919	1.0814E+00	-7.4714E-04	2.0985E-07	-----	298	1000
948	C9H20	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	18.986	6.8130E-01	-5.8717E-05	-2.2116E-07	8.5439E-11	150	1500
949	C9H20O	2,6-DIMETHYL-4-HEPTANOL	-26.633	1.0358E+00	-7.3051E-04	2.6868E-07	-4.1207E-11	298	1500
950	C9H20O	1-NONANOL	13.919	8.1238E-01	-3.1365E-04	-6.4537E-08	5.1036E-11	200	1500
951	C9H20O	2-NONANOL	-15.877	9.8909E-01	-6.6014E-04	2.1150E-07	-1.9683E-11	298	1200
952	C9H20S	n-NONYL MERCAPTAN	66.762	5.6153E-01	1.4375E-04	-3.8391E-07	1.2953E-10	200	1500
953	C9H20S	BUTYL-PENTYL-SULFIDE	13.210	8.3559E-01	-3.8753E-04	6.5902E-08	-----	298	1000
954	C9H20S	ETHYL-HEPTYL-SULFIDE	10.905	8.5630E-01	-4.2668E-04	8.1270E-08	-----	298	1000
955	C9H20S	HEXYL-PROPYL-SULFIDE	13.210	8.3559E-01	-3.8753E-04	6.5902E-08	-----	298	1000
956	C9H20S	METHYL-OCTYL-SULFIDE	13.683	8.5337E-01	-4.3020E-04	8.3538E-08	-----	298	1000
957	C9H21N	n-NONYLAMINE	-12.915	9.9952E-01	-6.8214E-04	2.5663E-07	-4.1988E-11	298	1500
958	C9H21N	TRIPROPYLAMINE	-46.899	1.1357E+00	-8.4797E-04	3.3979E-07	-5.7551E-11	298	1500
959	C10H6O8	PYROMELLITIC ACID	-67.161	9.7245E-01	-6.8626E-04	1.9256E-07	-6.0900E-13	298	1500
960	C10H7Br	1-BROMONAPHTHALENE	-46.005	8.5830E-01	-7.4681E-04	3.2926E-07	-5.8743E-11	298	1500
961	C10H7Cl	1-CHLORONAPHTHALENE	-57.895	9.1225E-01	-8.3435E-04	3.8928E-07	-7.3276E-11	298	1500
962	C10H8	NAPHTHALENE	67.099	4.3239E-02	9.1740E-04	-1.0019E-06	3.0896E-10	50	1500
963	C10H8	AZULENE	-72.693	8.4458E-01	-6.2417E-04	1.7962E-07	-----	298	1000
964	C10H9N	QUINALDINE	-65.789	9.5661E-01	-8.0989E-04	3.4702E-07	-6.0324E-11	298	1500
965	C10H10	m-DIVINYLBENZENE	-35.543	8.5580E-01	-7.3218E-04	3.3133E-07	-6.2061E-11	298	1500
966	C10H10	1-METHYLINDENE	-48.066	9.3476E-01	-8.3220E-04	3.8682E-07	-7.4167E-11	298	1500
967	C10H10	2-METHYLINDENE	-49.008	9.3164E-01	-8.2626E-04	3.8402E-07	-7.3411E-11	298	1500
968	C10H10O4	DIMETHYL PHTHALATE	-60.400	9.3881E-01	-5.4837E-04	6.5470E-09	7.7122E-11	298	1200
969	C10H10O4	DIMETHYL TEREPHTHALATE	-132.654	1.3389E+00	-1.2518E-03	4.2932E-07	2.8171E-11	298	1000
970	C10H12	DICYCLOPENTADIENE	-147.089	1.3677E+00	-1.3862E-03	7.1581E-07	-1.4513E-10	298	1500
971	C10H12	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	-51.694	8.3545E-01	-5.0119E-04	1.1368E-07	-6.7703E-13	200	1500
972	C10H12O	ANETHOLE	-45.965	9.3023E-01	-7.2535E-04	2.9642E-07	-5.0285E-11	298	1500
973	C10H12O4	DIALLYL MALEATE	-47.979	1.3810E+00	-1.5324E-03	8.8301E-07	-1.9930E-10	298	1500
974	C10H14	n-BUTYLBENZENE	26.627	5.3108E-01	3.7958E-05	-2.7954E-07	1.0200E-10	200	1500
975	C10H14	sec-BUTYLBENZENE	104.794	1.1063E-01	8.1144E-04	-8.6635E-07	2.5831E-10	200	1500
976	C10H14	tert-BUTYLBENZENE	-53.936	9.6706E-01	-7.1192E-04	2.5338E-07	-3.4001E-11	275	1500
977	C10H14	1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	4.848	7.3283E-01	-4.0722E-04	8.5575E-08	-----	298	1000
978	C10H14	m-CYMENE	31.855	4.9392E-01	1.1261E-04	-3.3794E-07	1.1778E-10	200	1500
979	C10H14	o-CYMENE	-38.033	8.6610E-01	-5.5561E-04	1.6108E-07	-1.4651E-11	298	1500
980	C10H14	p-CYMENE	36.759	4.6194E-01	1.6776E-04	-3.7638E-07	1.2734E-10	200	1500
981	C10H14	m-DIETHYLBENZENE	24.047	5.5431E-01	-1.1581E-05	-2.4047E-07	9.0827E-11	200	1500
982	C10H14	o-DIETHYLBENZENE	34.267	5.3592E-01	-5.9210E-06	-2.3425E-07	8.7499E-11	200	1500
983	C10H14	p-DIETHYLBENZENE	28.958	5.2201E-01	4.4335E-05	-2.7933E-07	1.0033E-10	200	1500
984	C10H14	2-ETHYL-m-XYLENE	-32.782	9.0529E-01	-6.7917E-04	2.6936E-07	-4.5691E-11	298	1500
985	C10H14	2-ETHYL-p-XYLENE	-32.097	8.7204E-01	-6.1913E-04	2.2900E-07	-3.5721E-11	298	1500
986	C10H14	3-ETHYL-o-XYLENE	-37.474	9.3807E-01	-7.5782E-04	3.4813E-07	-7.3906E-11	298	1200
987	C10H14	4-ETHYL-m-XYLENE	-32.097	8.7204E-01	-6.1913E-04	2.2900E-07	-3.5721E-11	298	1500
988	C10H14	4-ETHYL-o-XYLENE	-32.097	8.7204E-01	-6.1913E-04	2.2900E-07	-3.5721E-11	298	1500
989	C10H14	5-ETHYL-m-XYLENE	-24.187	7.9716E-01	-4.8265E-04	1.3407E-07	-1.2432E-11	298	1500
990	C10H14	ISOBUTYLBENZENE	-70.878	1.0445E+00	-8.7778E-04	3.9154E-07	-7.1408E-11	298	1600
991	C10H14	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	55.191	3.9958E-01	2.2251E-04	-3.8570E-07	1.2358E-10	150	1500
992	C10H14	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	29.751	5.6692E-01	-1.1573E-04	-1.1468E-07	4.8575E-11	200	1500
993	C10H14O	p-tert-BUTYLPHENOL	-70.607	1.1546E+00	-1.0219E-03	4.6879E-07	-8.7947E-11	298	1500
994	C10H14O2	p-tert-BUTYL CATECHOL	-66.567	1.2468E+00	-1.1749E-03	5.7126E-07	-1.1278E-10	298	1500
995	C10H15N	N,N-DIETHYLANILINE	-103.246	1.2315E+00	-1.0695E-03	4.8560E-07	-9.0354E-11	298	1500
996	C10H15N	2,6-DIETHYLANILINE	-45.098	1.0631E+00	-8.9633E-04	4.0581E-07	-7.6550E-11	298	1500
997	C10H16	CAMPHENE	-154.624	1.3370E+00	-1.0808E-03	4.5075E-07	-7.7569E-11	298	1500
998	C10H16	D-LIMONENE	-75.119	1.1283E+00	-9.4007E-04	4.2286E-07	-7.9691E-11	298	1500
999	C10H16	alpha-PHELLANDRENE	-99.641	1.2604E+00	-1.1540E-03	5.6750E-07	-1.1500E-10	298	1500
1000	C10H16	beta-PHELLANDRENE	-102.519	1.2851E+00	-1.1913E-03	5.8754E-07	-1.1834E-10	298	1500
1001	C10H16	alpha-PINENE	-200.422	1.4834E+00	-1.2692E-03	5.4464E-07	-9.4071E-11	298	1500
1002	C10H16	beta-PINENE	-140.815	1.3045E+00	-1.0299E-03	4.0838E-07	-6.5221E-11	298	1500
1003	C10H16	alpha-TERPINENE	-49.869	1.1280E+00	-1.0188E-03	5.0169E-07	-1.0246E-10	298	1500
1004	C10H16	gamma-TERPINENE	-71.384	1.2266E+00	-1.1733E-03	6.0467E-07	-1.2738E-10	298	1500
1005	C10H16	TERPINOLENE	-59.866	1.0552E+00	-8.3267E-04	3.5840E-07	-6.6028E-11	298	1500
1006	C10H16O	CAMPHOR	-145.746	1.3060E+00	-9.5043E-04	3.2082E-07	-3.9497E-11	298	1500
1007	C10H18	1-DECYNE	6.678	8.5299E-01	-5.0112E-04	1.1788E-07	-----	298	1000
1008	C10H18	cis-DECAHYDRONAPHTHALENE	-22.786	6.4589E-01	1.8319E-04	-4.7868E-07	1.6380E-10	200	1500
1009	C10H18	trans-DECAHYDRONAPHTHALENE	1.778	4.8130E-01	5.2802E-04	-7.6032E-07	2.4097E-10	150	1500
1010	C10H18O4	SEBACIC ACID	12.334	1.0779E+00	-7.8296E-04	2.9696E-07	-4.8452E-11	298	1500
1011	C10H20	n-BUTYLCYCLOHEXANE	90.421	2.3264E-01	9.4595E-04	-1.0571E-06	3.1928E-10	150	1500
1012	C10H20	1-CYCLOPENTYLPENTANE	-67.341	1.0922E+00	-7.0400E-04	1.9059E-07	-----	298	1000
1013	C10H20	1-DECENE	121.553	2.0974E-01	7.8760E-04	-8.6982E-07	2.6033E-10	150	1500
1014	C10H20O	1-DECANAL	210.932	-1.8370E-01	1.5621E-03	-1.4857E-06	4.2973E-10	150	1500

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
1015	C10H20O2	n-DECANOIC ACID	16.364	9.3012E-01	-4.7163E-04	5.8799E-08	1.1477E-11	298	1200
1016	C10H20O2	2-ETHYLHEXYL ACETATE	-18.921	1.1337E+00	-8.6008E-04	3.5303E-07	-6.1420E-11	298	1500
1017	C10H20O2	ISOPENTYL ISOVALERATE	-49.541	1.2738E+00	-1.0883E-03	5.0965E-07	-9.9751E-11	298	1500
1018	C10H22	n-DECANE	31.780	7.4489E-01	-1.0945E-04	-2.2668E-07	9.3458E-11	200	1500
1019	C10H22	2-METHYLNONANE	57.338	5.8226E-01	2.2492E-04	-4.8905E-07	1.6519E-10	150	1500
1020	C10H22	3-METHYLNONANE	49.113	6.2101E-01	1.5367E-04	-4.3414E-07	1.5034E-10	150	1500
1021	C10H22	4-METHYLNONANE	43.716	6.5491E-01	9.6751E-05	-3.9509E-07	1.4060E-10	150	1500
1022	C10H22	5-METHYLNONANE	46.011	6.3918E-01	1.2507E-04	-4.1575E-07	1.4602E-10	150	1500
1023	C10H22	3-ETHYLOCTANE	-6.595	9.6968E-01	-5.4271E-04	1.1646E-07	-----	298	1000
1024	C10H22	4-ETHYLOCTANE	-6.595	9.6968E-01	-5.4271E-04	1.1646E-07	-----	298	1000
1025	C10H22	2,2-DIMETHYLOCTANE	50.808	6.2243E-01	1.6032E-04	-4.2638E-07	1.4566E-10	150	1500
1026	C10H22	2,3-DIMETHYLOCTANE	-30.720	1.0547E+00	-6.4091E-04	1.5416E-07	-----	298	1000
1027	C10H22	2,4-DIMETHYLOCTANE	-16.035	1.0059E+00	-5.8672E-04	1.3405E-07	-----	298	1000
1028	C10H22	2,5-DIMETHYLOCTANE	-30.720	1.0547E+00	-6.4091E-04	1.5416E-07	-----	298	1000
1029	C10H22	2,6-DIMETHYLOCTANE	-30.720	1.0547E+00	-6.4091E-04	1.5416E-07	-----	298	1000
1030	C10H22	2,7-DIMETHYLOCTANE	-15.284	1.0017E+00	-5.7881E-04	1.2969E-07	-----	298	1000
1031	C10H22	3,3-DIMETHYLOCTANE	-28.772	1.0848E+00	-6.9220E-04	1.7847E-07	-----	298	1000
1032	C10H22	3,4-DIMETHYLOCTANE	-31.481	1.0590E+00	-6.4894E-04	1.5857E-07	-----	298	1000
1033	C10H22	3,5-DIMETHYLOCTANE	-46.170	1.1080E+00	-7.0316E-04	1.7870E-07	-----	298	1000
1034	C10H22	3,6-DIMETHYLOCTANE	-46.170	1.1080E+00	-7.0316E-04	1.7870E-07	-----	298	1000
1035	C10H22	4,4-DIMETHYLOCTANE	-28.772	1.0848E+00	-6.9220E-04	1.7847E-07	-----	298	1000
1036	C10H22	4,5-DIMETHYLOCTANE	-31.481	1.0590E+00	-6.4894E-04	1.5857E-07	-----	298	1000
1037	C10H22	4-PROPYLHEPTANE	-22.025	1.0228E+00	-6.0476E-04	1.4090E-07	-----	298	1000
1038	C10H22	4-ISOPROPYLHEPTANE	-31.481	1.0590E+00	-6.4894E-04	1.5857E-07	-----	298	1000
1039	C10H22	3-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	-31.481	1.0590E+00	-6.4894E-04	1.5857E-07	-----	298	1000
1040	C10H22	4-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	-46.170	1.1080E+00	-7.0316E-04	1.7870E-07	-----	298	1000
1041	C10H22	5-ETHYL-2-METHYLHEPTANE	-46.170	1.1080E+00	-7.0316E-04	1.7870E-07	-----	298	1000
1042	C10H22	3-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	-44.217	1.1379E+00	-7.5438E-04	2.0299E-07	-----	298	1000
1043	C10H22	4-ETHYL-3-METHYLHEPTANE	-46.928	1.1122E+00	-7.1111E-04	1.8308E-07	-----	298	1000
1044	C10H22	3-ETHYL-5-METHYLHEPTANE	-61.605	1.1611E+00	-7.6525E-04	2.0317E-07	-----	298	1000
1045	C10H22	3-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	-46.928	1.1122E+00	-7.1111E-04	1.8308E-07	-----	298	1000
1046	C10H22	4-ETHYL-4-METHYLHEPTANE	-44.217	1.1379E+00	-7.5438E-04	2.0299E-07	-----	298	1000
1047	C10H22	2,2,3-TRIMETHYLHEPTANE	-38.215	1.1210E+00	-7.3626E-04	1.9608E-07	-----	298	1000
1048	C10H22	2,2,4-TRIMETHYLHEPTANE	-52.894	1.1698E+00	-7.9040E-04	2.1617E-07	-----	298	1000
1049	C10H22	2,2,5-TRIMETHYLHEPTANE	-52.894	1.1698E+00	-7.9040E-04	2.1617E-07	-----	298	1000
1050	C10H22	2,2,6-TRIMETHYLHEPTANE	-37.470	1.1168E+00	-7.2839E-04	1.9175E-07	-----	298	1000
1051	C10H22	2,3,3-TRIMETHYLHEPTANE	-38.215	1.1210E+00	-7.3626E-04	1.9608E-07	-----	298	1000
1052	C10H22	2,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	-40.930	1.0952E+00	-6.9304E-04	1.7620E-07	-----	298	1000
1053	C10H22	2,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	-55.626	1.1442E+00	-7.4730E-04	1.9636E-07	-----	298	1000
1054	C10H22	2,3,6-TRIMETHYLHEPTANE	-40.185	1.0911E+00	-6.8517E-04	1.7187E-07	-----	298	1000
1055	C10H22	2,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	-52.894	1.1698E+00	-7.9040E-04	2.1617E-07	-----	298	1000
1056	C10H22	2,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	-55.626	1.1442E+00	-7.4730E-04	1.9636E-07	-----	298	1000
1057	C10H22	2,4,6-TRIMETHYLHEPTANE	-54.873	1.1400E+00	-7.3940E-04	1.9200E-07	-----	298	1000
1058	C10H22	2,5,5-TRIMETHYLHEPTANE	-52.894	1.1698E+00	-7.9040E-04	2.1617E-07	-----	298	1000
1059	C10H22	3,3,4-TRIMETHYLHEPTANE	-53.660	1.1741E+00	-7.9847E-04	2.2060E-07	-----	298	1000
1060	C10H22	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	-68.028	1.2211E+00	-8.4889E-04	2.3852E-07	-----	298	1000
1061	C10H22	3,4,4-TRIMETHYLHEPTANE	-53.660	1.1741E+00	-7.9847E-04	2.2060E-07	-----	298	1000
1062	C10H22	3,4,5-TRIMETHYLHEPTANE	-56.367	1.1483E+00	-7.5517E-04	2.0067E-07	-----	298	1000
1063	C10H22	3-ISOPROPYL-2-METHYLHEXANE	-40.930	1.0952E+00	-6.9304E-04	1.7620E-07	-----	298	1000
1064	C10H22	3,3-DIETHYLHEXANE	-59.647	1.1910E+00	-8.1647E-04	2.2743E-07	-----	298	1000
1065	C10H22	3,4-DIETHYLHEXANE	-62.363	1.1653E+00	-7.7325E-04	2.0755E-07	-----	298	1000
1066	C10H22	3-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	-53.660	1.1741E+00	-7.9847E-04	2.2060E-07	-----	298	1000
1067	C10H22	4-ETHYL-2,2-DIMETHYLHEXANE	-68.350	1.2231E+00	-8.5270E-04	2.4073E-07	-----	298	1000
1068	C10H22	3-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	-53.660	1.1741E+00	-7.9847E-04	2.2060E-07	-----	298	1000
1069	C10H22	4-ETHYL-2,3-DIMETHYLHEXANE	-56.367	1.1483E+00	-7.5517E-04	2.0067E-07	-----	298	1000
1070	C10H22	3-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	-56.367	1.1483E+00	-7.5517E-04	2.0067E-07	-----	298	1000
1071	C10H22	4-ETHYL-2,4-DIMETHYLHEXANE	-68.350	1.2231E+00	-8.5270E-04	2.4073E-07	-----	298	1000
1072	C10H22	3-ETHYL-2,5-DIMETHYLHEXANE	-55.739	1.1449E+00	-7.4852E-04	1.9698E-07	-----	298	1000
1073	C10H22	4-ETHYL-3,3-DIMETHYLHEXANE	-69.099	1.2273E+00	-8.6057E-04	2.4507E-07	-----	298	1000
1074	C10H22	3-ETHYL-3,4-DIMETHYLHEXANE	-69.099	1.2273E+00	-8.6057E-04	2.4507E-07	-----	298	1000
1075	C10H22	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	-56.275	1.2191E+00	-8.6659E-04	2.5087E-07	-----	298	1000
1076	C10H22	2,2,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1077	C10H22	2,2,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	-62.354	1.2061E+00	-8.3462E-04	2.3385E-07	-----	298	1000
1078	C10H22	2,2,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	-75.086	1.2850E+00	-9.4002E-04	2.7825E-07	-----	298	1000
1079	C10H22	2,2,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	-62.354	1.2061E+00	-8.3462E-04	2.3385E-07	-----	298	1000
1080	C10H22	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	-59.655	1.2319E+00	-8.7797E-04	2.5381E-07	-----	298	1000
1081	C10H22	2,3,3,4-TETRAMETHYLHEXANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1082	C10H22	2,3,3,5-TETRAMETHYLHEXANE	-62.354	1.2061E+00	-8.3462E-04	2.3385E-07	-----	298	1000
1083	C10H22	2,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1084	C10H22	2,3,4,5-TETRAMETHYLHEXANE	-50.367	1.1314E+00	-7.3705E-04	1.9379E-07	-----	298	1000
1085	C10H22	3,3,4,4-TETRAMETHYLHEXANE	-71.835	1.2727E+00	-9.2948E-04	2.7570E-07	-----	298	1000
1086	C10H22	2,4-DIMETHYL-3-ISOPROPYLPENTANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1087	C10H22	3,3-DIETHYL-2-METHYLPENTANE	-69.099	1.2273E+00	-8.6057E-04	2.4507E-07	-----	298	1000
1088	C10H22	3-ETHYL-2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	-71.701	1.2721E+00	-9.2864E-04	2.7531E-07	-----	298	1000
1089	C10H22	3-ETHYL-2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1090	C10H22	3-ETHYL-2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	-63.111	1.2103E+00	-8.4257E-04	2.3823E-07	-----	298	1000
1091	C10H22	2,2,3,3,4-PENTAMETHYLPENTANE	-57.509	1.2215E+00	-8.7257E-04	2.5417E-07	-----	298	1000
1092	C10H22	2,2,3,4,4-PENTAMETHYLPENTANE	-69.860	1.2724E+00	-9.3006E-04	2.7583E-07	-----	298	1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
1093	C10H22O	1-DECANOL	15.733	8.9157E-01	-3.3219E-04	-8.6679E-08	6.1276E-11	200	1500
1094	C10H22O	Di-n-PENTYL ETHER	-17.080	1.0765E+00	-7.2109E-04	2.5716E-07	-3.9483E-11	298	1500
1095	C10H22O	ISODECANOL	-34.228	1.1729E+00	-8.9588E-04	3.7908E-07	-6.8013E-11	298	1500
1096	C10H22O5	TETRAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	-62.043	1.4737E+00	-1.2136E-03	5.2774E-07	-9.7123E-11	298	1500
1097	C10H22S	n-DECYL MERCAPTAN	70.441	6.2988E-01	1.4669E-04	-4.2347E-07	1.4459E-10	200	1500
1098	C10H22S	BUTYL-HEXYL-SULFIDE	12.094	9.3174E-01	-4.4396E-04	7.8948E-08	-----	298	1000
1099	C10H22S	ETHYL-OCTYL-SULFIDE	9.551	9.5358E-01	-4.8476E-04	9.4985E-08	-----	298	1000
1100	C10H22S	HEPTYL-PROPYL-SULFIDE	12.094	9.3174E-01	-4.4396E-04	7.8948E-08	-----	298	1000
1101	C10H22S	METHYL-NONYL-SULFIDE	12.344	9.5052E-01	-4.8811E-04	9.7178E-08	-----	298	1000
1102	C10H22S	PENTYL-SULFIDE	12.094	9.3174E-01	-4.4396E-04	7.8948E-08	-----	298	1000
1103	C10H22S2	PENTYL-DISULFIDE	17.922	1.0309E+00	-5.8676E-04	1.3407E-07	-----	298	1000
1104	C10H23N	n-DECYLAMINE	-9.825	1.0697E+00	-6.7989E-04	2.1931E-07	-2.9272E-11	298	1500
1105	C11H10	1-METHYLNAPHTHALENE	-8.325	6.5561E-01	-2.3148E-04	-8.6605E-08	5.3577E-11	200	1500
1106	C11H10	2-METHYLNAPHTHALENE	-0.899	6.1854E-01	-1.8095E-04	-1.1454E-07	5.9208E-11	200	1500
1107	C11H14O2	n-BUTYL BENZOATE	-84.783	1.1780E+00	-9.7914E-04	4.2833E-07	-7.6038E-11	298	1500
1108	C11H16	n-PENTYLBENZENE	-4.484	7.7970E-01	-2.7838E-04	-7.5740E-08	5.1215E-11	200	1500
1109	C11H16O	p-tert-AMYLPHENOL	-71.475	1.2516E+00	-1.0881E-03	4.9607E-07	-9.3224E-11	298	1500
1110	C11H20	1-UNDECYNE	5.865	9.4705E-01	-5.5333E-04	1.2835E-07	-----	298	1000
1111	C11H20O2	2-ETHYLHEXYL ACRYLATE	-44.392	1.3753E+00	-1.2506E-03	6.2600E-07	-1.2931E-10	298	1500
1112	C11H22	1-UNDECENE	132.612	2.4011E-01	8.5062E-04	-9.4540E-07	2.8339E-10	150	1500
1113	C11H22	1-CYCLOPENTYLHEXANE	-68.262	1.1870E+00	-7.5781E-04	2.0198E-07	-----	298	1000
1114	C11H22	PENTYLCYCLOHEXANE	-65.480	1.1809E+00	-6.8379E-04	1.4580E-07	-----	298	1000
1115	C11H22O	1-UNDECANAL	2.102	1.0578E+00	-6.7455E-04	2.2287E-07	-3.1192E-11	298	1500
1116	C11H24	n-UNDECANE	125.212	3.1401E-01	7.9137E-04	-9.1410E-07	2.7568E-10	150	1500
1117	C11H24O	1-UNDECANOL	16.702	9.7755E-01	-3.6662E-04	-9.5146E-08	6.7752E-11	200	1500
1118	C11H24S	UNDECYL MERCAPTAN	74.322	6.9712E-01	1.5160E-04	-4.6448E-07	1.6008E-10	200	1500
1119	C11H24S	BUTYL-HEPTYL-SULFIDE	10.773	1.0288E+00	-5.0175E-04	9.2508E-08	-----	298	1000
1120	C11H24S	DECYL-METHYL-SULFIDE	11.252	1.0464E+00	-5.4405E-04	1.0991E-07	-----	298	1000
1121	C11H24S	ETHYL-NONYL-SULFIDE	8.459	1.0494E+00	-5.4070E-04	1.0772E-07	-----	298	1000
1122	C11H24S	OCTYL-PROPYL-SULFIDE	10.773	1.0288E+00	-5.0175E-04	9.2508E-08	-----	298	1000
1123	C12H8O	DIBENZOFURAN	-14.004	5.8793E-01	9.7079E-05	-4.4225E-07	1.6599E-10	100	1500
1124	C12H9N	DIBENZOPYRROLE	-117.362	1.3214E+00	-1.3019E-03	6.4403E-07	-1.2737E-10	298	1500
1125	C12H10	ACENAPHTHENE	-61.063	9.6388E-01	-7.2100E-04	2.6234E-07	-3.6857E-11	200	1500
1126	C12H10	BIPHENYL	-29.153	7.6716E-01	-3.4341E-04	-3.7724E-08	4.6179E-11	200	1500
1127	C12H10O	DIPHENYL ETHER	-118.442	1.2856E+00	-1.2190E-03	5.9127E-07	-1.1547E-10	298	1500
1128	C12H11N	p-AMINODIPHENYL	-95.528	1.2611E+00	-1.1955E-03	5.8242E-07	-1.1477E-10	298	1500
1129	C12H11N	DIPHENYLAMINE	-119.401	1.3060E+00	-1.2200E-03	5.8764E-07	-1.1447E-10	298	1500
1130	C12H11N3	p-AMINOAZOBENZENE	-160.867	1.7547E+00	-1.9301E-03	1.0499E-06	-2.2321E-10	298	1500
1131	C12H11N3	1,3-DIPHENYLTETRAZENE	-190.085	1.8079E+00	-1.9564E-03	1.0452E-06	-2.1809E-10	298	1500
1132	C12H12	1,2-DIMETHYLNAPHTHALENE	-59.463	1.0193E+00	-7.3258E-04	2.0709E-07	-----	298	1000
1133	C12H12	1,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	-51.764	9.8240E-01	-6.8768E-04	1.8992E-07	-----	298	1000
1134	C12H12	1,4-DIMETHYLNAPHTHALENE	-59.463	1.0193E+00	-7.3258E-04	2.0709E-07	-----	298	1000
1135	C12H12	1,5-DIMETHYLNAPHTHALENE	-59.463	1.0193E+00	-7.3258E-04	2.0709E-07	-----	298	1000
1136	C12H12	1,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	-51.764	9.8240E-01	-6.8768E-04	1.8992E-07	-----	298	1000
1137	C12H12	1,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	-51.764	9.8240E-01	-6.8768E-04	1.8992E-07	-----	298	1000
1138	C12H12	2,3-DIMETHYLNAPHTHALENE	-32.046	8.8584E-01	-5.6325E-04	1.3936E-07	-----	298	1000
1139	C12H12	2,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	-49.867	1.0029E+00	-7.9843E-04	3.3597E-07	-5.8987E-11	298	1500
1140	C12H12	2,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	-49.867	1.0029E+00	-7.9843E-04	3.3597E-07	-5.8987E-11	298	1500
1141	C12H12	1-ETHYLNAPHTHALENE	-77.162	1.1312E+00	-9.8675E-04	4.5204E-07	-8.5024E-11	298	1500
1142	C12H12	2-ETHYLNAPHTHALENE	-56.103	1.0022E+00	-7.1651E-04	2.0322E-07	-----	298	1000
1143	C12H12N2	p-AMINODIPHENYLAMINE	-109.455	1.3879E+00	-1.3126E-03	6.3299E-07	-1.2318E-10	298	1500
1144	C12H12N2	HYDRAZOBENZENE	-116.092	1.3797E+00	-1.3149E-03	6.4282E-07	-1.2675E-10	298	1500
1145	C12H14	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	-37.324	1.0980E+00	-9.2975E-04	4.1878E-07	-7.8898E-11	298	1500
1146	C12H14O4	DIETHYL PHTHALATE	-122.210	1.4777E+00	-1.3850E-03	6.7906E-07	-1.3210E-10	298	1500
1147	C12H16	CYCLOHEXYLBENZENE	-94.764	1.1349E+00	-6.8154E-04	1.4688E-07	2.5822E-12	298	1400
1148	C12H16	m-DIISOPROPYLBENZENE	-70.177	1.2283E+00	-9.8495E-04	4.2208E-07	-7.6005E-11	298	1500
1149	C12H16	p-DIISOPROPYLBENZENE	-70.177	1.2283E+00	-9.8495E-04	4.2208E-07	-7.6005E-11	298	1500
1150	C12H16	n-HEXYLBENZENE	39.655	6.4328E-01	6.6681E-05	-3.5564E-07	1.2779E-10	200	1500
1151	C12H18	1,2,3-TRIETHYLBENZENE	-10.544	9.5040E-01	-5.3559E-04	1.1260E-07	-----	298	1000
1152	C12H18	1,2,4-TRIETHYLBENZENE	-13.571	9.6324E-01	-5.4802E-04	1.1608E-07	-----	298	1000
1153	C12H18	1,3,5-TRIETHYLBENZENE	-25.200	1.0011E+00	-5.9132E-04	1.3307E-07	-----	298	1000
1154	C12H18	HEXAMETHYLBENZENE	3.380	1.0043E+00	-6.6300E-04	1.8064E-07	-----	298	1000
1155	C12H20O4	DIBUTYL MALEATE	68.479	9.1396E-01	-4.0061E-04	1.5325E-08	2.1770E-11	298	1500
1156	C12H22	BICYCLOHEXYL	-122.649	1.3647E+00	-7.9966E-04	1.8314E-07	-5.1919E-12	298	1500
1157	C12H22	1-DODECYNE	4.031	1.0475E+00	-6.1798E-04	1.4619E-07	-----	298	1000
1158	C12H23N	DICYCLOHEXYLAMINE	-128.032	1.4622E+00	-8.6193E-04	1.8462E-07	3.6227E-13	298	1500
1159	C12H24	1-DODECENE	83.102	6.2741E-01	2.2136E-04	-4.7938E-07	1.5890E-10	200	1500
1160	C12H24	1-CYCLOPENTYLHEPTANE	-69.308	1.2824E+00	-8.1257E-04	2.1379E-07	-----	298	1000
1161	C12H24	1-CYCLOHEXYLHEXANE	-66.659	1.2774E+00	-7.4103E-04	1.5921E-07	-----	298	1000
1162	C12H24O	1-DODECANAL	4.271	1.1290E+00	-6.7200E-04	1.8542E-07	-1.7582E-11	298	1500
1163	C12H24O2	n-DODECANOIC ACID	-4.295	1.2373E+00	-8.2209E-04	2.7680E-07	-3.8871E-11	298	1500
1164	C12H26	n-DODECANE	71.498	7.2559E-01	1.1553E-04	-4.1196E-07	1.4141E-10	200	1500
1165	C12H26O	Di-n-HEXYL ETHER	-18.114	1.2587E+00	-8.1053E-04	2.6448E-07	-3.5458E-11	298	1500
1166	C12H26O	1-DODECANOL	17.965	1.0602E+00	-3.9244E-04	-1.1142E-07	7.6380E-11	200	1500
1167	C12H26O3	DIETHYLENE GLYCOL Di-n-BUTYL ETHER	-45.437	1.5002E+00	-1.1545E-03	4.8538E-07	-8.9144E-11	298	1500
1168	C12H26S	n-DODECYL MERCAPTAN	-15.335	1.2989E+00	-9.1285E-04	3.6369E-07	-6.4587E-11	298	1500
1169	C12H26S	BUTYL-OCTYL-SULFIDE	9.659	1.1248E+00	-5.5789E-04	1.0535E-07	-----	298	1000
1170	C12H26S	DECYL-ETHYL-SULFIDE	7.109	1.1468E+00	-5.9915E-04	1.2180E-07	-----	298	1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - joule/(mol K), T - K)								
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN TMAX
1171	C12H26S	HEXYL-SULFIDE	9.659	1.1248E+00	-5.5789E-04	1.0535E-07	-----	298 1000
1172	C12H26S	METHYL-UNDECYL-SULFIDE	9.886	1.1439E+00	-6.0266E-04	1.2407E-07	-----	298 1000
1173	C12H26S	NONYL-PROPYL-SULFIDE	9.659	1.1248E+00	-5.5789E-04	1.0535E-07	-----	298 1000
1174	C12H26S2	HEXYL-DISULFIDE	15.498	1.2240E+00	-7.0057E-04	1.6042E-07	-----	298 1000
1175	C12H27BO3	TRI-n-BUTYL BORATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1176	C12H27N	DODECYLAMINE	-18.410	1.3048E+00	-8.9181E-04	3.3488E-07	-5.5494E-11	298 1500
1177	C12H27N	TRI-n-BUTYLAMINE	-52.703	1.4429E+00	-1.0614E-03	4.2083E-07	-7.1662E-11	298 1500
1178	C13H10	FLUORENE	-74.758	1.0187E+00	-7.1721E-04	2.2140E-07	-2.0280E-11	200 1500
1179	C13H10O	BENZOPHENONE	-75.275	1.0612E+00	-7.8307E-04	2.7117E-07	-3.4873E-11	298 1500
1180	C13H12	DIPHENYLMETHANE	-100.298	1.2250E+00	-1.0670E-03	4.8040E-07	-8.7845E-11	298 1600
1181	C13H14	1-PROPYLNAPHTHALENE	-60.229	1.1155E+00	-7.8906E-04	2.1995E-07	-----	298 1000
1182	C13H14	2-PROPYLNAPHTHALENE	-53.154	1.0812E+00	-7.4705E-04	2.0346E-07	-----	298 1000
1183	C13H14	2ETHYL-3-METHYLNAPHTHALENE	-34.726	1.0000E+00	-6.4551E-04	1.6249E-07	-----	298 1000
1184	C13H14	2ETHYL-6-METHYLNAPHTHALENE	-79.040	1.2718E+00	-1.1243E-03	4.1640E-07	-----	298 1000
1185	C13H14	2ETHYL-7-METHYLNAPHTHALENE	-79.040	1.2718E+00	-1.1243E-03	4.1640E-07	-----	298 1000
1186	C13H20	n-HEPTYLBENZENE	45.886	7.0113E-01	7.7233E-05	-3.9047E-07	1.3976E-10	200 1500
1187	C13H24	1-TRIDECYNE	3.531	1.1404E+00	-6.6881E-04	1.5612E-07	-----	298 1000
1188	C13H26	1-TRIDECENE	88.663	6.8861E-01	2.2611E-04	-5.0981E-07	1.6963E-10	200 1500
1189	C13H26	1-CYCLOPENTYLOCTANE	-71.166	1.3829E+00	-8.7705E-04	2.3148E-07	-----	298 1000
1190	C13H26	1-CYCLOHEXYLHEPTANE	-68.166	1.3756E+00	-8.0040E-04	1.7339E-07	-----	298 1000
1191	C13H26O	1-TRIDECANOL	-1.839	1.2551E+00	-7.8737E-04	2.4389E-07	-2.9663E-11	298 1500
1192	C13H26O2	n-BUTYL NONANOATE	-58.657	1.6081E+00	-1.3740E-03	6.5735E-07	-1.3319E-10	298 1500
1193	C13H26O2	METHYL DODECANOATE	-28.448	1.4656E+00	-1.1419E-03	4.9828E-07	-9.3415E-11	298 1500
1194	C13H28	n-TRIDECANE	110.400	5.3321E-01	7.3984E-04	-1.0212E-06	3.2423E-10	150 1500
1195	C13H28O	1-TRIDECANOL	19.127	1.1452E+00	-4.2519E-04	-1.2106E-07	8.3188E-11	200 1500
1196	C13H28S	BUTYL-NONYL-SULFIDE	8.282	1.2223E+00	-6.1660E-04	1.1955E-07	-----	298 1000
1197	C13H28S	DECYL-PROPYL-SULFIDE	8.282	1.2223E+00	-6.1660E-04	1.1955E-07	-----	298 1000
1198	C13H28S	DODECYL-METHYL-SULFIDE	8.794	1.2397E+00	-6.5860E-04	1.3680E-07	-----	298 1000
1199	C13H28S	ETHYL-UNDECYL-SULFIDE	5.979	1.2429E+00	-6.5547E-04	1.3472E-07	-----	298 1000
1200	C13H28S	1-TRIDECANETHIOL	7.133	1.2506E+00	-6.7266E-04	1.4268E-07	-----	298 1000
1201	C14H8O2	ANTHRAQUINONE	-77.119	1.2856E+00	-1.3749E-03	9.3187E-07	-3.0596E-10	298 900
1202	C14H10	ANTHRACENE	-68.180	1.0788E+00	-8.1286E-04	2.9013E-07	-3.8196E-11	200 1500
1203	C14H10	DIPHENYLACETYLENE	-69.864	1.0800E+00	-8.1462E-04	2.8054E-07	-3.3905E-11	298 1500
1204	C14H10	PHENANTHRENE	-73.218	1.1192E+00	-8.9679E-04	3.5695E-07	-5.6466E-11	200 1500
1205	C14H12	cis-STILBENE	-96.782	1.2486E+00	-1.0880E-03	5.0166E-07	-9.5052E-11	298 1500
1206	C14H12	trans-STILBENE	-68.882	1.1174E+00	-8.3787E-04	3.0198E-07	-4.2209E-11	298 1500
1207	C14H12O2	BENZYL BENZOATE	-137.070	1.4041E+00	-1.1419E-03	4.2281E-07	-4.5129E-11	298 1200
1208	C14H14	1,1-DIPHENYLETHANE	-101.538	1.3208E+00	-1.1248E-03	4.9731E-07	-8.9846E-11	298 1600
1209	C14H14	1,2-DIPHENYLETHANE	-101.104	1.3200E+00	-1.1240E-03	4.9709E-07	-8.9901E-11	298 1600
1210	C14H14O	DIBENZYL ETHER	-133.169	1.4371E+00	-1.2020E-03	5.1612E-07	-9.1168E-11	298 1500
1211	C14H16	1-n-BUTYLNAPHTHALENE	71.101	4.0054E-01	7.3214E-04	-9.7479E-07	3.1420E-10	100 1500
1212	C14H16	2-BUTYLNAPHTHALENE	-52.467	1.1665E+00	-7.8488E-04	2.0665E-07	-----	298 1000
1213	C14H22	n-OCTYLBENZENE	51.588	7.6266E-01	8.0566E-05	-4.2003E-07	1.5047E-10	200 1500
1214	C14H22	1,2,3,4-TETRAETHYLBENZENE	-6.944	1.1986E+00	-7.5550E-04	1.9018E-07	-----	298 1000
1215	C14H22	1,2,3,5-TETRAETHYLBENZENE	-6.031	1.1701E+00	-7.0718E-04	1.6749E-07	-----	298 1000
1216	C14H22	1,2,4,5-TETRAETHYLBENZENE	20.140	1.0473E+00	-5.3568E-04	9.1090E-08	-----	298 1000
1217	C14H22O	p-tert-OCTYLPHENOL	-99.971	1.6764E+00	-1.4559E-03	6.5521E-07	-1.2088E-10	298 1500
1218	C14H28	1-TETRADECENE	167.903	3.1544E-01	1.0739E-03	-1.2004E-06	3.6046E-10	150 1500
1219	C14H28	1-CYCLOPENTYLNONANE	-71.931	1.4768E+00	-9.2922E-04	2.4200E-07	-----	298 1000
1220	C14H28	1-CYCLOHEXYLOCTANE	-66.463	1.4551E+00	-8.2822E-04	1.7154E-07	-----	298 1000
1221	C14H28O2	n-TETRADECANOIC ACID	-47.091	1.5789E+00	-1.1521E-03	4.4718E-07	-7.3810E-11	298 1500
1222	C14H30	n-TETRADECANE	115.502	6.0882E-01	6.8043E-04	-9.7091E-07	3.0756E-10	150 1500
1223	C14H30O	1-TETRADECANOL	20.531	1.2268E+00	-4.4901E-04	-1.3852E-07	9.2055E-11	200 1500
1224	C14H30S	BUTYL-DECYL-SULFIDE	7.169	1.3183E+00	-6.7275E-04	1.3239E-07	-----	298 1000
1225	C14H30S	DODECYL-ETHYL-SULFIDE	4.734	1.3396E+00	-7.1270E-04	1.4807E-07	-----	298 1000
1226	C14H30S	HEPTYL-SULFIDE	7.169	1.3183E+00	-6.7275E-04	1.3239E-07	-----	298 1000
1227	C14H30S	METHYL-TRIDECYL-SULFIDE	7.532	1.3365E+00	-7.1601E-04	1.5024E-07	-----	298 1000
1228	C14H30S	PROPYL-UNDECYL-SULFIDE	7.169	1.3183E+00	-6.7275E-04	1.3239E-07	-----	298 1000
1229	C14H30S	1-TETRADECANETHIOL	5.882	1.3473E+00	-7.2998E-04	1.5606E-07	-----	298 1000
1230	C14H30S2	HEPTYL-DISULFIDE	13.023	1.4174E+00	-8.1529E-04	1.8739E-07	-----	298 1000
1231	C14H31N	TETRADECYLAMINE	-23.409	1.5091E+00	-1.0193E-03	3.6745E-07	-5.6794E-11	298 1500
1232	C15H10N2O2	DIPHENYLMETHANE-4,4'-DIISOCYANATE	-40.814	1.1664E+00	-8.2318E-04	2.6180E-07	-2.8364E-11	298 1500
1233	C15H16O	p-CUMYLPHENOL	-105.972	1.5282E+00	-1.3205E-03	5.8321E-07	-1.0494E-10	298 1500
1234	C15H16O2	BISPHENOL A	-106.990	1.6818E+00	-1.6100E-03	7.9103E-07	-1.5526E-10	298 1600
1235	C15H18	1-PENTYLNAPHTHALENE	-64.191	1.3167E+00	-9.1609E-04	2.5301E-07	-----	298 1000
1236	C15H18	2-PENTYLNAPHTHALENE	-55.601	1.2747E+00	-8.6220E-04	2.3086E-07	-----	298 1000
1237	C15H24	n-NONYLBENZENE	0.378	1.1149E+00	-3.9485E-04	-1.2822E-07	8.2222E-11	200 1500
1238	C15H24O	2,6-DI-tert-BUTYL-p-CRESOL	-85.106	1.6932E+00	-1.3931E-03	5.9127E-07	-1.0339E-10	298 1500
1239	C15H24O	NONYLPHENOL	-51.387	1.5081E+00	-1.1306E-03	4.4257E-07	-7.2709E-11	298 1500
1240	C15H28	1-PENTADECYNE	0.246	1.3379E+00	-7.9036E-04	1.8667E-07	-----	298 1000
1241	C15H30	1-PENTADECENE	26.049	1.1942E+00	-3.8640E-04	-1.8619E-07	1.0451E-10	200 1500
1242	C15H30	1-CYCLOPENTYLDODECANE	-73.011	1.5723E+00	-9.8395E-04	2.5373E-07	-----	298 1000
1243	C15H30	1-CYCLOHEXYLNONANE	-68.404	1.5558E+00	-8.9257E-04	1.8891E-07	-----	298 1000
1244	C15H30O2	PENTADECANOIC ACID	-12.682	1.5569E+00	-1.0581E-03	3.7408E-07	-5.6293E-11	298 1500
1245	C15H32	n-PENTADECANE	124.647	6.2706E-01	8.3164E-04	-1.1689E-06	3.7326E-10	150 1500
1246	C15H32O	1-PENTADECANOL	-5.044	1.4565E+00	-8.1601E-04	1.7556E-07	-----	298 1000
1247	C15H32S	BUTYL-UNDECYL-SULFIDE	5.949	1.4149E+00	-7.2973E-04	1.4562E-07	-----	298 1000
1248	C15H32S	DODECYL-PROPYL-SULFIDE	5.949	1.4149E+00	-7.2973E-04	1.4562E-07	-----	298 1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ $(C_p - \text{joule}/(\text{mol K}), T - \text{K})$									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
1249	C15H32S	ETHYL-TRIDECYL-SULFIDE	3.439	1.4367E+00	-7.7078E-04	1.6189E-07	-----	298	1000
1250	C15H32S	METHYL-TETRADECYL-SULFIDE	6.221	1.4338E+00	-7.7421E-04	1.6413E-07	-----	298	1000
1251	C15H32S	1-PENTADECANETHIOL	4.560	1.4447E+00	-7.8831E-04	1.7001E-07	-----	298	1000
1252	C16H10	FLUORANTHENE	-112.910	1.4495E+00	-1.3602E-03	6.4245E-07	-1.2194E-10	298	1500
1253	C16H10	PYRENE	27.191	5.8885E-01	2.4989E-04	-5.7314E-07	2.0114E-10	150	1500
1254	C16H12	1-PHENYLNAPHTHALENE	-114.610	1.4322E+00	-1.2669E-03	5.7235E-07	-1.0505E-10	298	1500
1255	C16H20	1-n-HEXYLNAPHTHALENE	-82.067	1.5218E+00	-1.2290E-03	5.2212E-07	-9.1550E-11	298	1500
1256	C16H22O4	DIBUTYL PHTHALATE	148.647	-3.1458E-01	4.5159E-03	-6.5996E-06	3.0370E-09	298	800
1257	C16H26	n-DECYLBENZENE	65.790	8.6789E-01	1.2244E-04	-5.0606E-07	1.7890E-10	200	1500
1258	C16H26	PENTAETHYLBENZENE	-15.092	1.4580E+00	-9.7337E-04	2.6329E-07	-----	298	1000
1259	C16H30	1-HEXADECYNE	-0.578	1.4321E+00	-8.4270E-04	1.9719E-07	-----	298	1000
1260	C16H32	n-DECYLCYCLOHEXANE	157.247	4.0618E-01	1.3486E-03	-1.5340E-06	4.6479E-10	150	1500
1261	C16H32	1-CYCLOPENTYLUNDECANE	-74.940	1.6734E+00	-1.0497E-03	2.7219E-07	-----	298	1000
1262	C16H32	1-HEXADECENE	108.689	8.5437E-01	2.7357E-04	-6.2732E-07	2.0929E-10	200	1500
1263	C16H32O2	n-HEXADECANOIC ACID	-54.487	1.8046E+00	-1.3388E-03	5.3671E-07	-9.2028E-11	298	1500
1264	C16H34	n-HEXADECANE	131.750	6.7397E-01	8.7770E-04	-1.2430E-06	3.9785E-10	150	1500
1265	C16H34O	DI-n-OCTYL ETHER	-33.322	1.7059E+00	-1.1626E-03	4.2114E-07	-6.4955E-11	298	1500
1266	C16H34O	1-HEXADECANOL	119.789	8.1674E-01	6.2364E-04	-1.0540E-06	3.4977E-10	150	1500
1267	C16H34S	BUTYL-DODECYL-SULFIDE	4.654	1.5120E+00	-7.8781E-04	1.5944E-07	-----	298	1000
1268	C16H34S	ETHYL-TETRADECYL-SULFIDE	2.086	1.5340E+00	-8.2898E-04	1.7579E-07	-----	298	1000
1269	C16H34S	METHYL-PENTADECYL-SULFIDE	4.843	1.5311E+00	-8.3266E-04	1.7816E-07	-----	298	1000
1270	C16H34S	OCTYL-SULFIDE	4.654	1.5120E+00	-7.8781E-04	1.5944E-07	-----	298	1000
1271	C16H34S	PROPYL-TRIDECYL-SULFIDE	4.654	1.5120E+00	-7.8781E-04	1.5944E-07	-----	298	1000
1272	C16H34S	1-HEXADECANETHIOL	3.223	1.5418E+00	-8.4634E-04	1.8383E-07	-----	298	1000
1273	C16H34S2	OCTYL-DISULFIDE	10.461	1.6113E+00	-9.3077E-04	2.1467E-07	-----	298	1000
1274	C17H28	n-UNDECYLBENZENE	2.711	1.2830E+00	-4.5442E-04	-1.5326E-07	9.7372E-11	200	1500
1275	C17H32	1-HEPTADECYNE	-1.487	1.5267E+00	-8.9638E-04	2.0853E-07	-----	298	1000
1276	C17H34	1-CYCLOPENTYLDODECANE	-75.781	1.7676E+00	-1.1022E-03	2.8279E-07	-----	298	1000
1277	C17H34	1-CYCLOHEXYLUNDECANE	-71.107	1.7505E+00	-1.0093E-03	2.1658E-07	-----	298	1000
1278	C17H34	1-HEPTADECENE	125.132	7.9164E-01	6.6154E-04	-1.0780E-06	3.5594E-10	150	1500
1279	C17H36	n-HEPTADECANE	111.903	9.9987E-01	2.7901E-04	-6.7520E-07	2.2545E-10	200	1500
1280	C17H36O	1-HEPTADECANOL	127.444	8.7086E-01	6.4059E-04	-1.0987E-06	3.6628E-10	150	1500
1281	C17H36S	BUTYL-TRIDECYL-SULFIDE	3.286	1.6093E+00	-8.4617E-04	1.7341E-07	-----	298	1000
1282	C17H36S	ETHYL-PENTADECYL-SULFIDE	1.074	1.6295E+00	-8.8420E-04	1.8811E-07	-----	298	1000
1283	C17H36S	HEXADECYL-METHYL-SULFIDE	3.852	1.6265E+00	-8.8768E-04	1.9038E-07	-----	298	1000
1284	C17H36S	PROPYL-TRIDECYL-SULFIDE	3.286	1.6093E+00	-8.4617E-04	1.7341E-07	-----	298	1000
1285	C17H36S	1-HEPTADECANETHIOL	2.201	1.6373E+00	-9.0169E-04	1.9621E-07	-----	298	1000
1286	C18H12	CHRYSENE	-41.414	1.1172E+00	-5.6061E-04	1.7203E-09	5.1921E-11	200	1500
1287	C18H14	m-TERPHENYL	-159.334	1.8173E+00	-1.7948E-03	9.0423E-07	-1.7969E-10	298	1600
1288	C18H14	p-TERPHENYL	-159.334	1.8173E+00	-1.7948E-03	9.0423E-07	-1.7969E-10	298	1600
1289	C18H14	o-TERPHENYL	-159.334	1.8173E+00	-1.7948E-03	9.0423E-07	-1.7969E-10	298	1600
1290	C18H15P	TRIPHENYLPHOSPHINE	-140.077	1.8099E+00	-1.7088E-03	8.3604E-07	-1.6512E-10	298	1500
1291	C18H15O4P	TRIPHENYL PHOSPHATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1292	C18H16N2	N,N'-DIPHENYL-p-PHENYLENEDIAMINE	-188.536	2.0474E+00	-1.9559E-03	9.5063E-07	-1.8600E-10	298	1500
1293	C18H22	2,3-DIMETHYL-2,3-DIPHENYLBUTANE	-159.612	1.9863E+00	-1.7695E-03	8.1753E-07	-1.5467E-10	298	1500
1294	C18H22O2	DICUMYL PEROXIDE	-76.744	1.6944E+00	-1.2744E-03	4.7912E-07	-7.3317E-11	298	1500
1295	C18H30	n-DODECYLBENZENE	106.695	7.7941E-01	5.8463E-04	-9.4162E-07	3.0397E-10	150	1500
1296	C18H30	HEXAETHYLBENZENE	-14.268	1.7028E+00	-1.1851E-03	3.3734E-07	-----	298	1000
1297	C18H32O2	LINOLEIC ACID	-113.518	2.1932E+00	-1.9690E-03	9.5258E-07	-1.7989E-10	298	1500
1298	C18H34	1-OCTADECYNE	-3.530	1.6283E+00	-9.6261E-04	2.2710E-07	-----	298	1000
1299	C18H34O2	OLEIC ACID	-55.663	1.9919E+00	-1.5562E-03	6.7067E-07	-1.2336E-10	298	1500
1300	C18H34O4	DIBUTYL SEBACATE	-64.966	2.2026E+00	-1.8844E-03	8.8961E-07	-1.7701E-10	298	1500
1301	C18H34O4	DIHEXYL ADIPATE	-64.614	2.0235E+00	-1.8000E-03	8.8573E-07	-1.8193E-10	298	1500
1302	C18H36	1-CYCLOPENTYLTRIDECANE	-76.584	1.8616E+00	-1.1543E-03	2.9320E-07	-----	298	1000
1303	C18H36	1-CYCLOHEXYLDODECANE	-73.659	1.8553E+00	-1.0810E-03	2.3798E-07	-----	298	1000
1304	C18H36	1-OCTADECENE	216.021	4.1046E-01	1.3808E-03	-1.5473E-06	4.6513E-10	150	1500
1305	C18H36O2	STEARIC ACID	7.515	1.6996E+00	-9.2847E-04	1.7563E-07	3.6437E-12	298	1200
1306	C18H38	n-OCTADECANE	124.715	9.8653E-01	3.4273E-04	-7.4838E-07	2.4804E-10	200	1500
1307	C18H38O	DINONYL ETHER	-39.993	1.9149E+00	-1.2953E-03	4.5896E-07	-6.9698E-11	298	1500
1308	C18H38O	1-OCTADECANOL	129.533	9.2997E-01	6.6025E-04	-1.1313E-06	3.7237E-10	150	1500
1309	C18H38S	BUTYL-TETRADECYL-SULFIDE	2.285	1.7048E+00	-9.0128E-04	1.8569E-07	-----	298	1000
1310	C18H38S	ETHYL-HEXADECYL-SULFIDE	-0.274	1.7267E+00	-9.4236E-04	2.0198E-07	-----	298	1000
1311	C18H38S	HEPTADECYL-METHYL-SULFIDE	2.546	1.7235E+00	-9.4546E-04	2.0405E-07	-----	298	1000
1312	C18H38S	NONYL-SULFIDE	2.285	1.7048E+00	-9.0128E-04	1.8569E-07	-----	298	1000
1313	C18H38S	PENTADECYL-PROPYL-SULFIDE	2.285	1.7048E+00	-9.0128E-04	1.8569E-07	-----	298	1000
1314	C18H38S	1-OCTADECANETHIOL	0.874	1.7344E+00	-9.5964E-04	2.0998E-07	-----	298	1000
1315	C18H38S2	NONYL-DISULFIDE	8.113	1.8040E+00	-1.0441E-03	2.4081E-07	-----	298	1000
1316	C19H26	1-n-NONYLNAPHTHALENE	-76.861	1.7404E+00	-1.2853E-03	4.9048E-07	-7.7646E-11	298	1500
1317	C19H32	n-TRIDECYLBENZENE	86.726	1.0288E+00	1.7917E-04	-6.3099E-07	2.2067E-10	200	1500
1318	C19H36	1-NONADECYNE	-4.361	1.7226E+00	-1.0154E-03	2.3793E-07	-----	298	1000
1319	C19H36O2	METHYL OLEATE	-44.058	2.0299E+00	-1.5136E-03	6.1226E-07	-1.0658E-10	298	1500
1320	C19H38	1-CYCLOPENTYLTETRADECANE	-78.538	1.9628E+00	-1.2203E-03	3.1177E-07	-----	298	1000
1321	C19H38	1-CYCLOHEXYLTRIDECANE	-74.538	1.9494E+00	-1.1329E-03	2.4803E-07	-----	298	1000
1322	C19H38	1-NONADECENE	69.594	1.2608E+00	3.8456E-06	-6.0097E-07	2.2323E-10	200	1500
1323	C19H38O2	NONADECANOIC ACID	-23.711	1.9781E+00	-1.3539E-03	4.8185E-07	-7.2339E-11	298	1500
1324	C19H40	n-NONADECANE	132.530	1.0358E+00	3.6926E-04	-7.9581E-07	2.6362E-10	200	1500
1325	C19H40O	1-NONADECANOL	-10.671	1.8473E+00	-1.0527E-03	2.3365E-07	-----	298	1000
1326	C19H40S	BUTYL-PENTADECYL-SULFIDE	0.926	1.8020E+00	-9.5956E-04	1.9961E-07	-----	298	1000

Table 2-1 HEAT CAPACITY OF GAS - ORGANIC COMPOUNDS (continued)

$C_p = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4$ (C _p - Joule/(mol K), T - K)									
NO	FORMULA	NAME	A	B	C	D	E	TMIN	TMAX
1327	C19H40S	ETHYL-HEPTADECYL-SULFIDE	-1.379	1.8227E+00	-9.9872E-04	2.1498E-07	-----	298	1000
1328	C19H40S	HEXADECYL-PROPYL-SULFIDE	0.926	1.8020E+00	-9.5956E-04	1.9961E-07	-----	298	1000
1329	C19H40S	METHYL-OCTADECYL-SULFIDE	1.431	1.8196E+00	-1.0019E-03	2.1709E-07	-----	298	1000
1330	C19H40S	1-NONADECANETHIOL	1.139	1.8243E+00	-1.0070E-03	2.1884E-07	-----	298	1000
1331	C20H16	TRIPHENYLETHYLENE	-122.663	1.7649E+00	-1.5644E-03	7.2308E-07	-1.3678E-10	298	1500
1332	C20H28	1-n-DECYLNAPHTHALENE	-82.955	1.8664E+00	-1.4003E-03	5.4871E-07	-8.9673E-11	298	1500
1333	C20H30O2	ABIETIC ACID	-260.137	2.7296E+00	-2.3498E-03	1.0242E-06	-1.8203E-10	298	1500
1334	C20H31N	DEHYDROABIETYLAMINE	-127.428	2.3347E+00	-2.0102E-03	9.0944E-07	-1.7163E-10	298	1200
1335	C20H34	1-PHENYLTETRADECANE	-53.024	1.8455E+00	-1.1361E-03	2.7552E-07	-----	298	1000
1336	C20H38	1-EICOSYNE	-5.184	1.8167E+00	-1.0677E-03	2.4845E-07	-----	298	1000
1337	C20H40	1-CYCLOPENTYLPENTADECANE	-79.601	2.0582E+00	-1.2749E-03	3.2342E-07	-----	298	1000
1338	C20H40	1-CYCLOHEXYLTETRADECANE	-75.450	2.0437E+00	-1.1851E-03	2.5824E-07	-----	298	1000
1339	C20H40	1-EICOSENE	125.107	1.1243E+00	2.5851E-04	-7.3027E-07	2.4754E-10	200	1500
1340	C20H42	n-EICOSANE	137.730	1.0992E+00	3.6839E-04	-8.2058E-07	2.7259E-10	200	1500
1341	C20H42O	1-EICOSANOL	149.479	9.8474E-01	8.2856E-04	-1.3392E-06	4.3815E-10	150	1500
1342	C20H42S	BUTYL-HEXADECYL-SULFIDE	-0.147	1.8979E+00	-1.0156E-03	2.1245E-07	-----	298	1000
1343	C20H42S	DECYL-SULFIDE	-0.147	1.8979E+00	-1.0156E-03	2.1245E-07	-----	298	1000
1344	C20H42S	ETHYL-OCTADECYL-SULFIDE	-2.711	1.9199E+00	-1.0566E-03	2.2859E-07	-----	298	1000
1345	C20H42S	HEPTADECYL-PROPYL-SULFIDE	-0.147	1.8979E+00	-1.0156E-03	2.1245E-07	-----	298	1000
1346	C20H42S	METHYL-NONADECYL-SULFIDE	0.087	1.9168E+00	-1.0598E-03	2.3076E-07	-----	298	1000
1347	C20H42S	1-EICOSANETHIOL	-1.585	1.9278E+00	-1.0740E-03	2.3669E-07	-----	298	1000
1348	C20H42S2	DECYL-DISULFIDE	5.649	1.9974E+00	-1.1587E-03	2.6773E-07	-----	298	1000
1349	C21H21O4P	TRI- <i>o</i> -CRESYL PHOSPHATE	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
1350	C21H36	1-PHENYLPENTADECANE	-54.969	1.9466E+00	-1.2016E-03	2.9377E-07	-----	298	1000
1351	C21H42	1-CYCLOPENTYLHEXADECANE	-80.324	2.1518E+00	-1.3266E-03	3.3374E-07	-----	298	1000
1352	C21H42	1-CYCLOHEXYLPENTADECANE	-77.977	2.1483E+00	-1.2565E-03	2.7954E-07	-----	298	1000
1353	C22H38	1-PHENYLHEXADECANE	-55.944	2.0416E+00	-1.2556E-03	3.0517E-07	-----	298	1000
1354	C22H44	1-CYCLOHEXYLHEXADECANE	-76.584	2.2301E+00	-1.2898E-03	2.8109E-07	-----	298	1000
1355	C22H44O2	n-BUTYL STEARATE	-69.046	2.5211E+00	-2.0966E-03	1.0835E-06	-2.7531E-10	298	1200
1356	C24H38O4	DIISOCTYL PHTHALATE	-87.607	2.2843E+00	-1.3309E-03	2.5129E-07	1.4926E-11	298	1500
1357	C24H38O4	DIOCTYL PHTHALATE	-82.524	2.2568E+00	-1.2639E-03	2.1577E-07	2.8112E-11	298	1100
1358	C24H42O	DINONYLPHENOL	-21.466	2.1296E+00	-1.0229E-03	-8.3690E-08	1.5876E-10	298	1000
1359	C26H20	TETRAPHENYLETHYLENE	-149.970	2.2370E+00	-1.9635E-03	8.9829E-07	-1.6846E-10	298	1500
1360	C28H46O4	DIISODECYL PHTHALATE	-128.947	2.9258E+00	-2.1855E-03	9.4298E-07	-2.1374E-10	298	1200

C_p - heat capacity of ideal gas, Joule/(mol K)

A, B, C, D, and E - regression coefficients for chemical compound

T - temperature, K

TMIN - minimum temperature, K

TMAX - maximum temperature, K

APÊNDICE 2 – Código do programa

```

classdef app1 < matlab.apps.AppBase

    % Properties that correspond to app components
    properties (Access = public)
        UIFigure                matlab.ui.Figure
        FonteYAWS1999Label      matlab.ui.control.Label
        InicialKLabel_4         matlab.ui.control.Label
        TFinal_3                matlab.ui.control.NumericEditField
        FinalKLabel_3           matlab.ui.control.Label
        TInicial_3              matlab.ui.control.NumericEditField
        InicialKLabel_3         matlab.ui.control.Label
        Entalpia_3              matlab.ui.control.NumericEditField
        H3Label                  matlab.ui.control.Label
        JgmolLabel_3            matlab.ui.control.Label
        TFinal_2                matlab.ui.control.NumericEditField
        FinalKLabel_2           matlab.ui.control.Label
        TInicial_2              matlab.ui.control.NumericEditField
        Entalpia_2              matlab.ui.control.NumericEditField
        H2Label                  matlab.ui.control.Label
        JgmolLabel_2            matlab.ui.control.Label
        ObservaoApressonoLabel_5 matlab.ui.control.Label
        ObservaoApressonoLabel_4 matlab.ui.control.Label
        ObservaoApressonoLabel_3 matlab.ui.control.Label
        ObservaoApressonoLabel_2 matlab.ui.control.Label
        ObservaoApressonoLabel matlab.ui.control.Label
        SelecionarestecompostoecalcularHButton matlab.ui.control.Button
        MostrartodatabelaButton matlab.ui.control.Button
        Image                    matlab.ui.control.Image
        JgmolLabel               matlab.ui.control.Label
        CompostoDropDown         matlab.ui.control.DropDown
        CompostoDropDownLabel    matlab.ui.control.Label
        Entalpia                 matlab.ui.control.NumericEditField
        H1Label                  matlab.ui.control.Label
        TFinal                   matlab.ui.control.NumericEditField
        FinalKLabel              matlab.ui.control.Label
        TInicial                 matlab.ui.control.NumericEditField
        InicialKLabel            matlab.ui.control.Label
        Tabela                   matlab.ui.control.Table
        ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel
    matlab.ui.control.Label
    end

    % Callbacks that handle component events
    methods (Access = private)

        % Button pushed function: MostrartodatabelaButton
        function MostrartodatabelaButtonPushed(app, event)
            % Botão que ao ser pressionado mostra toda base de dados na
            % tela do usuário
            tabela = readtable("BasededadosTCC.xlsx", 'Sheet', 1);
            app.Tabela.Data = tabela;
        end

        % Button pushed function: SelecionarestecompostoecalcularHButton
        function SelecionarestecompostoecalcularHButtonPushed(app, event)
            % Seleção do composto através da lista suspensa. O usuário pode

```

```

% também digitar a inicial do composto de interesse para
% encontrá-lo mais facilmente
Composto = app.CompostoDropDown.Value;

%tabela criada e importada
S = readtable("BasededadosTCC.csv", "TextType", "string");

%linha criada para mostrar apenas o composto de interesse
linha = S(S.Nome == Composto,:);
%Mostra na tela a linha escolhida
app.Tabela.Data = linha;

%Seleção da célula na tabela que contém o valor de A e
% posterior conversão para formato de variável
At = linha(1,4);
Aa = table2array(At);

%Seleção da célula na tabela que contém o valor de B e
% posterior conversão para formato de variável
Bt = linha(1,5);
Ba = table2array(Bt);

%Seleção da célula na tabela que contém o valor de C e
% posterior conversão para formato de variável
Ct = linha(1,6);
Ca = table2array(Ct);

%Seleção da célula na tabela que contém o valor de D e
% posterior conversão para formato de variável
Dt = linha(1,7);
Da = table2array(Dt);

%Seleção da célula na tabela que contém o valor de E e
% posterior conversão para formato de variável
Et = linha(1,8);
Ea = table2array(Et);

%Campo para inserção dos valores de temperatura inicial e final
T1 = app.TInicial.Value;
T2 = app.TFinal.Value;

%Toolbox do Matlab para símbolos matemáticos (Syms)
% Variável "T" atribuída para o cálculo da integral
syms T

% f é a função que será integrada (Cp)
f= Aa +(Ba*T)+(Ca*(T^2))+(Da*(T^3)+(Ea*(T^4)));
% Integral de Cp em pressão constante -> Variação de entalpia
F= int(f,T,T1,T2);

%programa mostra o valor obtido na tela
app.Entalpia.Value = double(F);

%Campo para inserção dos valores de temperatura inicial e final
T1_2 = app.TInicial_2.Value;
T2_2 = app.TFinal_2.Value;

syms X
% f é a função que será integrada (Cp)

```

```

f2= Aa +(Ba*X)+(Ca*(X^2))+(Da*(X^3)+(Ea*(X^4)));
% Integral de Cp em pressão constante -> Variação de entalpia
F2= int(f2,X,T1_2,T2_2);

%programa mostra o valor obtido na tela
app.Entalpia_2.Value = double(F2);

%Campo para inserção dos valores de temperatura inicial e final
T1_3 = app.TInicial_3.Value;
T2_3 = app.TFinal_3.Value;

syms Y
% f é a função que será integrada (Cp)
f3= Aa +(Ba*Y)+(Ca*(Y^2))+(Da*(Y^3)+(Ea*(Y^4)));
% Integral de Cp em pressão constante -> Variação de entalpia
F3= int(f3,Y,T1_3,T2_3);

%programa mostra o valor obtido na tela
app.Entalpia_3.Value = double(F3);
end
end

% Component initialization
methods (Access = private)

% Create UIFigure and components
function createComponents(app)

% Get the file path for locating images
pathToMLAPP = fileparts(mfilename('fullpath'));

% Create UIFigure and hide until all components are created
app.UIFigure = uifigure('Visible', 'off');
app.UIFigure.Position = [100 100 995 659];
app.UIFigure.Name = 'MATLAB App';

% Create ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel
app.ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel =
uicontrol(app.UIFigure);

app.ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel.FontSize = 18;

app.ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel.FontWeight =
'bold';

app.ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel.Position = [212 617
624 23];
app.ProgramaparaclculodevariaodaentalpiaCompostosOrgnicosLabel.Text =
'Programa para cálculo de variação da entalpia - Compostos Orgânicos';

% Create Tabela
app.Tabela = uitable(app.UIFigure);
app.Tabela.ColumnName = {'Fórmula'; 'Nome Inglês'; 'Composto'; 'A';
'B'; 'C'; 'D'; 'E'; 'T mínima'; 'T máxima'};
app.Tabela.RowName = {};
app.Tabela.FontWeight = 'bold';
app.Tabela.Position = [52 175 887 236];

% Create InicialKLabel

```

```

app.InicialKLabel = uilabel(app.UIFigure);
app.InicialKLabel.HorizontalAlignment = 'right';
app.InicialKLabel.FontWeight = 'bold';
app.InicialKLabel.Position = [49 564 144 22];
app.InicialKLabel.Text = 'Temperatura Inicial 1 (K)';

% Create TInicial
app.TInicial = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TInicial.FontWeight = 'bold';
app.TInicial.Position = [208 564 121 22];

% Create FinalKLabel
app.FinalKLabel = uilabel(app.UIFigure);
app.FinalKLabel.HorizontalAlignment = 'right';
app.FinalKLabel.FontWeight = 'bold';
app.FinalKLabel.Position = [391 564 138 22];
app.FinalKLabel.Text = 'Temperatura Final 1 (K)';

% Create TFinal
app.TFinal = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TFinal.FontWeight = 'bold';
app.TFinal.Position = [547 564 108 22];

% Create H1Label
app.H1Label = uilabel(app.UIFigure);
app.H1Label.HorizontalAlignment = 'right';
app.H1Label.FontName = 'Arial';
app.H1Label.FontSize = 18;
app.H1Label.FontWeight = 'bold';
app.H1Label.Position = [683 566 41 23];
app.H1Label.Text = ' $\Delta H_1$ ';

% Create Entalpia
app.Entalpia = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.Entalpia.ValueDisplayFormat = '%.3f';
app.Entalpia.FontName = 'Arial';
app.Entalpia.FontSize = 18;
app.Entalpia.FontWeight = 'bold';
app.Entalpia.Position = [731 565 100 24];

% Create CompostoDropDownLabel
app.CompostoDropDownLabel = uilabel(app.UIFigure);
app.CompostoDropDownLabel.HorizontalAlignment = 'right';
app.CompostoDropDownLabel.Position = [39 134 60 22];
app.CompostoDropDownLabel.Text = 'Composto';

% Create CompostoDropDown
app.CompostoDropDown = uidropdown(app.UIFigure);
app.CompostoDropDown.Items = {'BROMOCOLORODIFLUOROMETANO',
'BROMOTRICLOROMETANO', 'BROMOTRIFLUOROMETANO', 'DIBROMODIFLUOROMETANO',
'CLOROTRIFLUOROMETANO', 'CLORETO DE CIANOGENIO', 'DICLORODIFLUOROMETANO',
'FOSGENIO', 'TRICLOROFLUOROMETANO', 'TETRA CLORETO DE CARBONO', 'FLUORETO DE
CARBONILA', 'TETRAFLUORETO DE CARBONO', 'TRIBROMOMETANO', 'CLORODIFLUOROMETANO',
'DICLOROFLUOROMETANO', 'CLOROFORMIO', 'TRIFLUOROMETANO', 'TRIIODOMETANO', 'CIANETO
DE HIDROGENIO', 'ACIDO ISOTIOCIANICO', 'BROMOCOLOROMETANO', 'DIBROMOMETANO',
'CLOROFLUOROMETANO', 'DICLOROMETANO', 'DIFLUOROMETANO', 'DIODOMETANO',
'FORMALDEIDO', 'ACIDO FORMICO', 'BROMETO METILICO', 'CLORETO DE METILO', 'METIL
TRICLOROSILANO', 'FLUORETO DE METILA', 'METILIODETO', 'FORMAMIDA', 'NITROMETANO',
'METIL-NITRITO', 'METIL-NITRATO', 'METANO', 'DICLOROSILANO METILICO', 'METANOL',

```


'ÁCIDO METANOSULFÔNICO', 'METIL MERCAPTANO', 'CLOROSSILANO METÁLICO', 'METILAMINA', 'METIL SILANE', 'TETRANITROMETANO', 'MONÓXIDO DE CARBONO', 'SULFETO DE CARBONILA', 'DIÓXIDO DE CARBONO', 'DISSULFETO DE CARBONO', 'BROMOTRIFLUOROETILENO', '1.2-DIBROMOTETRAFLUOROETANO', 'CLOROTRIFLUOROETILENO', 'CLOROPENTAFLUOROETANO', '1.2-DICLOROTETRAFLUOROETANO', '1.1.2-TRICLOROTRIFLUOROETANO', 'TETRACLOROETILENO', '1.1.2.2-TETRACLORODIFLUOROETANO', 'CLORETO DE TRICLORDACETIL', 'HEXAFLUOROETANO', 'TETRAFLUOROETILENO', 'HEXAFLUOROETANO', 'HALOTANO', '2-CLORO-1.1-DIFLUOROETILENO', 'TRICLOROETILENO', 'CLORETO DE DICLOROACETILO', 'TRICLOROACETALDEÍDO', 'PENTAFLUOROETANO', 'TRIFLUOROETANO', 'ÁCIDO TRIFLUOROACÉTICO', 'PENTAFLUOROETANO', 'ACETILENO', '1.1.2.2-TETRABROMOETANO', '1.1-DICLOROETILENO', 'cis-1.2-DICLOROETILENO', 'trans-1.2-DICLOROETILENO', 'CLORETO DE CLOROACETILA', 'DICLOROACETALDEÍDO', 'ÁCIDO DICLOROACÉTICO', '1.1.1-TRICLOROFLUOROETANO', '1.1.1.2-TETRACLOROETANO', '1.1.2.2-TETRACLOROETANO', '1.1-DIFLUOROETILENO', 'cis-1.2-DIFLUOROETANO', 'trans-1.2-DIFLUOROETANO', '1.1.1.2-TETRAFLUOROETANO', 'CETENE', 'ÁCIDO OXÁLICO', 'BROMETO DE VINIL', 'CLORETO DE VINILA', '1-CLORO-1,1-DIFLUOROETANO', 'CLORETO DE ACETILA', 'CLOROACETALDEÍDO', 'ÁCIDO CLOROACÉTICO', 'METILCLOROFORMIATO', '1.1.1-TRICLOROETANO', '1.1.2-TRICLOROETANO', 'FLUORETO DE ETILO', '1.1.1-TRIFLUOROETANO', 'ACETONITRILA', 'SOCIANATO de metila', 'ETILENO', '1.1-DIBROMOETANO', '1.2-DIBROMOETANO', '1.1-DICLOROETANO', '1.2-DICLORODETHANE', 'BIS (CLOROMETIL)ÉTER', '1.1-DIFLUOROETANO', '1.2-DIFLUOROETANO', '1.2-DIIODODOETANO', 'ACETALDEÍDO', 'ÓXIDO DE ETILENO', 'ÁCIDO TIOACÉTICO', 'ÁCIDO ACÉTICO', 'METILFORMATO', 'TIACICLOPROPANO', 'BROMOETANO', 'CLORETO DE ETILA', '2-CLOROETANOL', 'FLUORETO DE ETILA', 'IODETO de etila', 'ETILENOIMINA', 'ACETAMIDA', 'N-METILFORMAMIDA', 'NITROETANO', 'ETILO-NITRATO', 'ETANO', 'CLORETO DE TIALUMÍNIO', 'DIMETIL ÉTER', 'ETANOL', 'SULFÓXIDO DE DIMETILO', 'ETILENOGLICOL', 'SULFATO DE DIMETILO', 'SULFETO DE DIMETILO', 'ETIL MERCAPTAN', 'DISSULFETO DE METILA', 'DIMETILAMINA', 'ETILAMINA', 'ETANOLAMINA', 'TILENODIAMINA', 'DIMETIL SILANO', 'CIANOGENÍO', 'HEXAFLUOROPROPILENO', 'HEXAFLUOROACETONA', 'OCTAFLUOROPROPANO', 'MALONONITRILA', 'CLORETO DE PROPARGILA', 'ACRILONITRILA', 'OXAZOL', 'METILACETILENO', 'PROPADIENO', '2.3-DICLOROPROPENO', 'ACROLEINA', 'ÁLCOOL PROPARGÍLICO', 'ÁCIDO ACRÍLICO', 'beta-PROPIOLACTONA', 'FORMATO VINIL', 'ÁCIDO PIRÚVICO', '3-BROMO-1-PROPENO', '2-CLOROPROPENO', '3-CLOROPROPENO', 'alfa-EPICLORIDRINA', 'CLOROACETATO DE METILA', 'ETILCLOROFORMIATO', '1.2.3-TRICLOROPROPANO', '3-iodo-1-PROPANO', 'PROPIONITRILA', 'ACRILAMIDA', 'HIDRACRILONITRILA', 'LACTONITRILA', 'CICLOPROPANO', 'PROPILENO', '1,2-DIBROMOPROPANO', '1.1-DICLOROPROPANO', '1,2-DICLOROPROPANO', '1.3-DICLOROPROPANO', '1.2-DICLOROPROPANO', '1.2-DIIODOPROPANO', 'ACETONA', 'ÁLCOOL ALIL', 'ÉTER METÁLICO VINÍLICO', 'n-PROPIONALDEÍDO', '1,2 ÓXIDO PROPILENO', '1.3-ÓXIDO DE PROPILENO', 'FORMATO ETIL', 'ACETATO DE METILA', 'ÁCIDO PROPIÔNICO', 'ÁCIDO 3-MERCAPTOPROPIÔNICO', 'ÁCIDO LÁCTICO', 'ÁCIDO METOXIACÉTICO', 'TRIOXANO', 'TIACICLOBUTANO', '1-BROMOPROPANO', '2-BROMOPROPANO', 'CLORETO DE ISOPROPILA', 'CLORETO DE N-PROPILA', '1-FLUOROPROPANO', '2-FLUOROPROPANO', 'IODETO de ISOPROPILA', 'n-IODETO DE PROPILA', 'ALLAMINA', 'PROPILENOMINA', 'NN-DIMETILFORMAMIDA', 'N-METILACETAMIDA', '1-NITROPROPANO', '2-NITROPROPANO', 'PROPIL-NITRATO', 'NITRATO DE ISOPROPILA', 'PROPANO', 'ISOPROPANOL', 'ÉTER METILETÁLICO', 'n-PROPANOL', '2-METOXIETANO', 'METILAL', '1.2-PROPILENOGLICOL', '1.3-PROPILENOGLICOL', 'GLICEROL', 'n-PROPILMERCAPTANO', 'SOPROPYLMERCAPTAN', 'ETIL-METIL-SULFETO', 'n-PROPILAMINA', 'ISOPROPILAMINA', 'TRIMETILAMINA', '1-AMINO-2-PROPANOL', '3-AMINO-1-PROPANOL', 'METILETANOLAMINA', '1.2-PROPANEDIAMINA', 'TRIMETILSILANO', 'TETRACLOROTIOFENO', 'HEXAFLUORO-1,3-BUTADIENO', 'OCTAFLUORO-2-BUTENO', 'OCTAFLUOROCICLOBUTANO', 'DECAFLUOROBUTANO', 'BUTADIENO (BIACETILENO)', 'ANIDRIDO MAÉICO', 'VINILACETILENO', 'SUCCINONITRILA', 'FURANO', 'DIKETENE', 'ANIDRIDO SUCCÍNICO', 'ÁCIDO FUMÁRICO', 'ÁCIDO MAÉICO', 'TIOFENO', 'CLOROPRENO', 'trans-CROTONITRILA', 'dis-CROTONITRILA', 'METACRILONITRILA', 'PIRROL', 'VINILACETONITRILA', 'CIANOACETATO DE METILA', 'CICLOBUTENO', '1.2-BUTADIENO', '1.3-BUTADIENO', 'DIMETILACETILENO', 'ETILACETILENO', '1.3-DICLORO-trans-2-BUTENO', '1.4-DICLORO-cis-2-BUTENO', '1.4-DICLORO-trans-2-BUTENO', '3.4-DICLORO-1-BUTENO', 'trans-CROTONALDEÍDO', '2.5-IDROFURANO', 'DIVINIL ETHER', 'METACROLEÍNA',

'2-BUTILENO-1.4-DIOL', 'gamms-BUTIROLACTONA', 'ds-ÁCIDO CROTÔNICO', 'ÁCIDO TRANS-CROTÔNICO', 'ÁCIDO METÁCRÍLICO', 'ACILATO DE METILA', 'VINYLACETATE', 'ANIDRIDO ACÉTICO', 'ÁCIDO SUCCÍNICO', 'ÁCIDO DIGLICÓLICO', 'ÁCIDO MALIC', 'ÁCIDO TARTARIO', 'B-BUTIRONITRILA', 'ISOBUTIRONITRINILA', 'ACETONE CIANOIDRINA', 'ETACRILAMIDA', '3-METOXIPROPIONITRIL', '2-PIRROLIDONA', '1-BUTENO', 'cis-2-BUTENO', 'trans-2-BUTENO', 'CICLOBUTANO', 'ISOBUTENO', '1.2-DIBROMOBUTANO', '2.3-DIBROMOBUTANO', '1.4-DICLOROBUTANO', '1.2-DNCOCBUTANO', 'n-BUTIRALDEÍDO', 'ISOBUTYRALDEHYDI', '1.2-EPOXIBUTANO', 'METILETIL CETONA', 'ÉTER ETÍLICO VINÍLICO', 'TETRAHYOROFURAN', 'da-2-BUTENO-1.4-DIOL', 'trans-2-BUTENO-1,4-DIOL', 'ÁCIDO ISOBUTÍRICO', 'ÁCIDO N-BUTÍRICO', '1,4-DIOXANO', 'ACETATO DE ETILA', 'PROPIONATO DE METILO', 'FORMATO N-PROPILO', 'SULFOLANO', 'TETRAHIDROTIOFENO', '1-BROMOBUTANO', '2-BROMOBUTANO', 'CLORETO DE N-BUTILO', 'sec-CLORETO BUTÍLICO', 'CLORETO DE TERT-BUTILO', '24000-2-METILPROPANO', 'PIRROLIDINA', 'N,N-DIMETILACETAMIDA', 'MORFOLINA', '1-NITROBUTANO', '2-NITROBUTANO', 'n-BUTANO', 'ISOBUTANO', 'PIPERAZINA', 'n-BUTANOL', 'sec-BUTANOL', 'tert-BUTANOL', 'DIETIL ETHER', 'ÉTER METIL-PROPILO', 'ÉTER METILISOPROPÍLICO', 'ISOBUTANOL', '1,3-BUTANODIOL', '1.4-BUTANODIOL', '2.3-BUTANODIOL', 'HIDROPERÓXIDO DE 1-BUTILO', '1,2-DIMETOXIETA', '2-ETOXIETANOL', 'DIETILENOGLICOL', 'SULFATO DE DIETILA', 'n-BUTYL MERCAPTAN', 'ISOBUTYL MERCAPTAN', 'sec-BUTYL MERCAPTAN', 'tert-BUTILO MERCAPTANO', 'SULFETO DE DIETILA', 'SOPROPIL-METILO', 'METIL-PROPIL-SULFETO', 'DIETHY DISULFETO', 'n-BUTILAMINA', 'ISOBUTILAMINA', 'sec-BUTILAMINA', 'tert-BUTILAMINA', 'DIETILAMINA', 'DIMETILETANOLAMINA', 'DIETANOLAMINA', '2-AMINOETOXIETANOL', 'N-AMINOETILETANOLAMINANO', 'TETRAMETILSILANO', 'DIETILENO TRIAMINA', 'HEXACLOROCICLOPENTADENO', 'FURFURAL', 'PIRIDINA', 'CICLOPENTADIENO', '2-METIL-1-BUTENO-3-YNI', '1-PENTENE-3-YNE', '1-PENTENE-4-YNE', 'GLUTARONITRILA', 'FURFURY ÁLCOOL', 'GLUTARIO ANHYDRICE', 'ÁCIDO CITRACÔNICO', 'ITACONICA', '2-METILTOFENO', '3-METÉIA TIOFENO', 'N-METILPIRROL', 'CIANOACETATO DE ETILA', 'CICLOPENTENO', 'ISOPRENO', '3-METIL-1.2-BASTADIENO', '2-METIL-1.3-BASTADIENO', '1.2-PENTADIENO', 'cis-1.3-PENTADIENO', 'trans-1,3-PENTADIENO', '1.4-PENTADIENO', '2.3-PENTADIENO', '1-PENTYNE', '2-PENTYNE', '3-METIL-1-BUTILO', 'SPIROPENTANO', 'CICLOPENTANONA', 'METILISOPROPENILCETONA', 'ACETILACETONA', 'ACETATO DE ALILO', 'ACILATO DE ETILA', 'METACRILATO de metila', 'PROPIONATO DE VINIL', 'ACILATO DE 2HIDROXIETIA', 'ÁCIDO LEVULÍNICO', 'ACETOACETATO de METILA', 'ÁCIDO GLUTÁRICO', 'VALERONITRILA', 'n-ISOCIANATO DE BUTILO', 'N-METIL-2-PIRROLIDONA', 'ÁCIDO L-GLUTÂMICO', 'CICLOPENTANO', '2-METIL-1-BUTENO', '2-METIL-2-BUENO', '3-METIL-1-BBUTENO', '1-PENTENO', 'dis-2-PENTENO', 'trans-2-PENTENT', '2.3-DIBROMO-2-METILBUTANO', '1.5-DICLOROPENTANO', 'METIL ISOPROPILCETONA', '2-PENTANONA', 'TIL CETONA', 'VALERALDEÍDO', 'FORMATO DE BUTIL', 'PROPIONATO de ETILA', 'FORMATO DE ISOBUTILO', 'ACETATO de ISOPROPILO', 'ACETATO DE N-PROPILO', 'N-BUTILATO de metilo', 'ÁCIDO 2-METILBUTÍRICO', 'ÁCIDO ISOVALÉRICO', 'ÁCIDO VALÉRICO', 'ÁLCOOL TETRAHIDROFURFURÍLICO', '3-METHY SULFOLANO', 'LACTATO DE ETILA', 'TIACICLOHEXANO', 'CICLOPENTANETHIOL', '1-BROMOPENTANO', '1-CLOROPENTANO', '1-CLORO-3-METILBUTANO', '2-CLORO-2-METILBUTANO', 'N-METILPIRROLIDINA', 'PIPERIDINA', 'tert-BUTYUFORMAMIDA', 'ISOPENTANO', 'NEOPENTANO', 'n-PENTANO', '2.2-DIMETIL-1-PROPANO', 'tert-PENTYL-ÁLCOOL', '2-METIL-1-BUTANOL', '2-METIL-2-BUTANOL', '3-METIL-1-BUTANOL', '3-METIL-2-BUTANOL', '1-PENTANOL', '2-PENTANOL', '3-PENTANOL', 'METIL SE-BUTILÉTER', 'ÉLDER DE METIL TERC-BUTILO', 'ÉTER METIL SOBUTÍLICO', 'ETIL PROPILETER', 'ÉTER MONOPROPÍLICO DE ETILENOGLICOL', 'NEOPENTILGLICOL', '1.5-PENTANODIOL', '2-(2-METOXIETOXI)ETANOL', 'PENTAERITRITOL', 'n-PENTILO MERCAPTAN', 'BUTIL-METIL-SULFETO', 'ETIL-PROPIL-SULFETO', '2-METIL-2-BUTANOTIO', 'n-PENTYLAMINE', 'METANOLAMINA', 'HEXACLOROBENZENO', 'HEXAFLUOROBENZENO', '1-CLORO-24-DINITROBENZENO', '1.2-DICLORO-4-NITROBENZENO', '1.2.4-TRICLOROBENZENO', '1.3.5-TRINITROBENZENO', 'm-DIBROMOBENZENO', 'm-CLORONITROBENZENO', 'oCLORONITROBENZENO', 'pCLORONITROBENZENO', 'm-DICLOROBENZENO', 'o-DICLOROBENZENO', 'pDICLOROBENZENO', 'm-DIFLUOROBENZENO', 'o-DIFLUOROBENZENO', 'p-DIFLUOROBENZENO', 'm-OINITROBENZENO', 'o-DINITROBENZENO', 'p-ONITROBENZENO', 'BROMOBENZENO', 'MONOCLOROBENZENO', 'n-CLOROFENOL', 'o-CLOROFENOL', 'p-CLOROFENOL', '3.4-DICLOROANILINA', 'FLUOROBENZENO', 'ICDOBENZENO', 'NITROBENZENO', 'BENZENO', '#NOME?', 'oCHLOROANIL, INE', 'o-CLOROANILINA', 'cis-DICIANO-1-BUTENO', 'trans-DICIANO-1-BUTENO', '1.4-

DICIANO-2-BUTENO', 'm-NITROANILINA', 'o-NITROANILINA', 'p-NITROANILINA', 'FENOL',
 '1.2-BENZENEDIL', '1,3-BENZENEDIL', 'c-HIDROQUINONA', '1,2,3-BENZENETRIL', 'FENIL
 MERCAPTANO', 'ANILINA', '2-METILPIRIDINA', '3-METILPIRIDINA', '4-METILPIRIDINA',
 '1.3-CICLOHEXADIENO', 'METILCICLOPENTADIENO', 'ADIPONITRILA',
 'METILGLUTARONITRILA', 'm-FENILENODIAMINA', 'g-FENILENODIAMINA', 'D-
 FENILENODIAMINA', 'FENILHIDRAZINA', 'ÉTER BIS(CIANOETIL)', 'MALEATO DE DIMETILO',
 'ÁCIDO ASCÓRBICO', 'CITRIC ACIO', '1-METILCICLOPENTENO', '3-METILCICLOPENTENO',
 '#NOME?', 'CICLOHEXENO', '3-DIMETIL-1.3-BASTADIENO', '1.5-HEXADIENO', 'ds, trans-
 2.4-HEXADIENO', 'trans, trans-2.4-HEXADIENO', '1-HEXYNE', '2-HEXYNE', '3-HEXYNE',
 'CICLOHEXANONA', 'ÓXIDO DE MESITYLA', 'epsion-CAPROLACTONA', 'ETILMETACRILATO',
 'ACRILATO DE P-PROPILO', 'ETHILACETATO', 'ANIDRIDO PROPIÔNICO', 'ÁCIDO ADÍPICO',
 'DIETIL OXALATO', 'DIACETATO DE ETILENOGLICOL', 'DIACETATO DE ETILIDENO',
 'HEXANENITRILA', 'épsia-CAPROLACTAMA', 'CICLOHEXANONA OXIMA', 'CICLOHEXANO', '2.3-
 DIMETIL-1-BUENO', '2.3-DIMETIL-2-BUTENO', '3.3-DIMETIL-1-BUTENO', '2-ETIL-1-
 BONENO', 'trans-3-METIL-2-PENTENO', '1-HEXENE', 'ds-2-HEXENE', 'trans-2-HEXENO',
 'dis-3-HEXENE', 'trans-3-HEXENE', 'METILCICLOPENTANO', '2-METIL-1-PENTENO', '2-
 METIL-2-PENTENO', '3-METIL-1-PENTENO', '3-METIL-cis-2-PENTENO', '4-METIL-1-
 PENTENO', '4-METIL-cis-2-PENTENO', '4-METIL-trans-2-PENTENO', 'TRIETILENODIAMINA',
 'BUTILVINILÉTER', 'CICLOHEXANOL', '1-HEXANAL', 'ETIL ISOPROPIL CETONA', '2-
 HEXANONA', '3-HEXANONA', 'METIL SOBUTILCETONA', 'n-PENTYL FORMATE', 'ACETATO DE N-
 BUTILO', 'sec-BUTYL ACETATE', 'ACETATO DE TERT-BUTILO', 'N-BABUTARATO de ETILO',
 'ISOBUTIRATO de ETIL', 'ACETATO de ISOBUTILO', 'PROPIONATO IN-PROPY', 'PERÓXIDO DE
 CICLO-HEXILA', 'ÁLCOOL DE DIACETONA', 'ÁCIDO 2-ETIL BUTÍRICO', 'ÁCIDO N-
 HEXANÓICO', 'ACETATO de 2-ETOXIETILO', 'ÁCIDO HIDROXICAPRÓICO', 'PARALDEÍDO',
 'THACYCLOHEPTANE', 'CICLO-HIXILAMINA', 'HEXAMETILENOIMINA', '2.2-DIMETILBUTANO',
 '2.3-DIMETILBUTANO', 'n-HEXANO', 'TILPENTANO', '0-METILPENTANO', 'LISINA', '2-
 ETIL-1-BUTANOL', '1-HEXANOL', '2-HEXANOL', '2-METIL-1-PENTANOL', '4-METIL-2-
 PENTANOL', 'ÉTER ETÍLICO N-BUTÍLICO', 'DISOPROPILO ETHER', 'Di-n-PROPYL ETHER',
 'ETHER METIL terc-PENTIL', 'ACETAL', '2-8UTOXIETANOL', '1,6-HEXANODIOL', 'HEXILENO
 GLICOL', 'Di-n-PROPILO SULFONA', 'ÉTER DIMETÍLICO DE DIETILENOGLICOL',
 'DIPROPILENOGLICOL', '2-(2-ETOXIETOXI)ETANOL', 'TRIMETILOLPROPANO',
 'TRIETILENOGLICOL', 'SORBITOL', 'em-HEXYLMERCAPTAN', 'BUTIL-ETIL-SULFETO',
 'ISOPROPIL-SULFETO', 'METIL-PENTIL-SULFETO', 'SULFETO DE PROPILO', 'DISSULFETO DE
 PROPILO', 'SESQUICLORETO DE ALUMÍNIO ETILO', 'DIISOPROPILAMINA', 'DI-n-
 PROPILAMINA', 'n-HEXILAMINA', 'TRIETILAMINA', '6-AMINOHEXANOL',
 'DIISOPROPANOLAMINA', 'TRIETANOLAMINA', 'N-AMINOETIL PIPERAZINA',
 'EXAMEETILENODIAMINA', 'TETRAMINA TRIETILENO', 'HEXAMETILDISILOXANO',
 'HEXAMETILCICLOTRIISILOXANO', 'HEXAMETILDISILOXANO', '4-CLORO-3-
 NITROBENZOTRIFLUORETO', '2.4-DICLOROBENZOTRIFLUORETO', 'ISOCIANATO de 3.4-
 DICLOROFENILO', 'p-CLOROBENZOTRIFLUORETO', 'm-CLOROBENZOILCLORETO', '3-
 NITROBENZOTRIFLUORETO', 'CLORETO DE BENZOÍLA', 'ÁCIDO o-CLOROBENZÓICO',
 'BENZOTRICLORETO', 'BENZOTRIFLUORETO', 'BENZONITRILA', 'ISOCIANATO de fenilo',
 '2.4.6-TRINITROTOLUENO', 'BENZILDICLORETO', '2.4-DICLOROTOLUENO', '2.4-
 DINITROTOLUENO', '2.5-DINITROTOLUENO', '2.6-DINITROTOLUENO', '3.4-DINITROTOLUENO',
 '3.5-DINITROTOLUENO', 'BENZALDEHYDE', 'ÁCIDO BENZOICO', 'p-HYDRXYBENZALDEÍDO',
 'SALICYLALDEÍDO', 'ÁCIDO SALICÍLICO', 'p-BROMOTOLUENO', 'CLORETO DE BENZILA', 'o-
 CLOROTOLUENO', 'p-CLOROTOLUENO', 'p-FLUOROTOLUENO', 'FORMANIUDE', 'm-
 NITROTOLUENO', 'o-NITROTOLUENO', 'p-NITROTOLUENO', 'o-NITROANISCLE', 'TOLUENO',
 '1.3.5-CICLOHEPTATRIENO', 'ANISOLE', 'ÁLCOOL BENZÍLICO', 'm-CRESOL', 'o-CRESOL',
 'p-CRESOL', 'GUAIACOL', 'p-METOXIFENOL', 'BENZILAMINA', '2.6-DIMETILPIRIDINA', 'N-
 METILANILINA', 'm-TOLUIDINA', 'o-TOLUIDINA', 'p-TOLUIDINA', '2-NORBORNENO',
 'TOLUENEDIAMINA', 'ISOCIANATO DE CICLO-HEXILO', '1-HEPTYNE', 'ACRILATO DE N-
 BUTILO', 'CIRATO DE ISOBUTILO', 'TACRILATO DE N-PROPILO', 'METALONATO de DIETILO',
 'CYCLOHEPTANI', '11-DIMETILCYCLOPENTANE', 'cis-1.2-DIMETILCICLOPENTANO', 'trans-
 1,2-DIMETILCICLOPENTANO', '4-1.3-DIMETILCICLOPENTANO', 'trans-1,3-
 DIMETILCICLOPENTANO', 'ETILCICLOPENTANO', '2-ETIL-1-PENTENO', '3-ETIL-1-PENTENO',
 '1-HEPTENO', 'ds-2-HEPTENE', 'trans-2-HEPTENE', 'ds-3-HEPTENE', 'trans-3-
 HEPTENE', 'METILCICLOHEXANO', '2-METIL-1-HEXENO', '3-METIL-1-HEXENO', '#NOME?',
 '2.3.3-TRIMETIL-1-BUTENO', 'DISOPROPIL CETONA', '2-HEPTANONA', '1-HEPTANAL', '1-

METILCICLOHEXANOL', 'cis-2-METILCICLOHEXANOL', 'trans-2-METILCICLOHEXANOL', 'cis-3-METILCICLOHEXANOL', 'trans-3-METILCICLOHEXANOL', 'cis-4-METILCICLOHEXANOL', 'trans-4-METILCICLOHEXANOL', '5-METIL-2-HEXANONA', 'PROPIONATO DE N-BUTILO', 'ISOVALERATO DE ETIL', 'ISOPENTIL ACETATO', 'inPENTILACETATO', 'n-PROPIlN-BUTILATO', 'n-HEPTANOICO AC', 'TIL-3-ETOXIPROPIONATO', '1-BROMOHEPTANE', 'N-METILCICLO-hexilamina', '2.2-DIMETILPENTANO', '2.3-DIMETILPENTANO', '2.4-DIMETILPENTANO', '3.3-DIMETILPENTANO', 'M-ETILPENTANO', 'n-HEPTANO', '2-METILHEXANO', '3-METILHEXANO', '2.2.3-TRIMETILBUTANO', '1-HEPTANOL', '2-HEPTANOL', 'METIL-S-HEXANOL', 'ÉTER ISOPROPIL-TERC-BUTILO', 'n-HEPTIL MERCAPTANO', 'BUTIL-PROPIL-SULFÍDEO', 'ETIL-PENTIL-SULFETO', 'SULFETO DE TILO HEXYL ME', '1-AMINOHEPTANO', 'CLORETO DE IFTALOILO', 'ANIDRIDO PHTÁLICO', 'ETINELBENZENO', 'ÁCIDO ISOFTÁLICO', 'PHTÁLICO', 'ÁCIDO TEREFTÁLICO', 'BENZOTIOFENO', 'INDOL', 'ESTIRENO', '1.3.5.7-CICLOOCTATETRAENO', 'ACETOFENONA', 'p-TOLUALDEÍDO', 'BENZOATO DE METILO', '© -ÁCIDO TOLUICO', 'ÁCIDO p-TOLÚICO', 'SALICILATO de metila', 'VANILINA', 'ACETANILIDE', 'ELTILBENZENO', 'm-XILENO', 'o-XILENO', 'p-XILENO', 'METILFENOL', 'PETILFENOL', 'PHENETOLE', '2-FENILETANOL', '2.3-XILENOL', '2,4-XILENOL', '2,5-XILENOL', '2,6-XILENOL', '3.4-XILENOL', '3,5-XILENOL', 'N.N-DIMETILANILINA', 'E-TEHANILINA', '2.4.6-TRIMETILPIRIDINA', 'e-FENETIDINA', '1.5-CICLOOCTADIENO', 'VINILCICLOHEXENO', '1.4-CICLOHEXANODICARBOXÍLICO', 'MALEATO DE DIETILO', 'n-MATALARLATO de BUTILO', 'BUTILICICANHIDRETO', 'DIETILSUCCINATO', 'CICLOOCTANO', '11-DIMETILCICLOHEXANO', 'dis-1.2-DIMETILCICLOHEXANO', 'trans-1.2-DIMETILCICLOHEXANO', 'dis-1.3-DIMETILCICLOMEXANO', 'rans-13-0METHYLCYCLOHEXANE', 'ds-14-DIMETILCICLOMEXANO', 'tans-14-DIMETILCICLOHEXANO', 'ETILCICLOMEXANO', '2-ETIL-1-HEXENO', '1-METIL-1-ETILCICLOPENTANO', '1-OCTENE', 'trans-2-OCTENO', 'trans-3-OCTENO', 'trans-4-OCTENE', 'in-PROPYLCYCLOPENTANE', '2.4.4-TRIMETIL-1-PENTENO', '24.4-TRIMETIL-2-PENTENO', '2-ETILHEXANAL', '1-OCTANAL', '2-OCTANONE', 'n-BUTILO n-BABUTARATO', 'n-HEXYL ACETATE', 'SOBUTIRATO de ISOBUTILO', 'A-OCTANCICA', 'ACETATO DE ÉTER ETÍLICO DE DIETILENO', '2.2-DIMETILHEXANO', '2.3-DIMETILHEXANO', '2.4-DIMETILHEXANO', '2.5-DIMETILHEXANO', '3.3-DIMETILHEXANO', '3.4-DIMETILHEXANO', '3-ETILHEXANO', '3-ETIL-2-METILPENTANO', '3-METIL-3-ETILPENTANO', '2-METILHEPTANO', '3-METILHEPTANO', '4-METILHEPTANO', 'n-OCTANE', '2.2.3-TRIMETILPENTANO', '2.2.4-TRIMETILPENTANO', '2.3.3-TRIMETILPENTANO', '23.4-TRIMETILPENTANO', '2.2.3.3-TETRAMETILBUTANO', 'DI-n-BUTYL ETHER', 'Di-sec-BUTYL ETHER', 'Di-tert-BUTYL ETHER', '2-ETIL-1-HEXANOL', '1-OCTANOL', '2-OCTANOL', 'PERÓXIDO DE DI-I-BUTILO', 'SULFONA DE DI-N-BUTILO', 'ÉTER DIETÍLICO DIETILENOGLICOL', 'DIETILENOGLICOL MONOBUTILO EHTER', 'ÉTER DIMETÍLICO DE TRIETILENOGLICOL', 'TETRAETILENOGLICOL', 'n-OCTYL MERCAPTAN', 'tert-OCTYL MERCAPTAN', 'BUTIL-SULFETO', 'ETIL-HEXIL-SULFETO', 'HEPTIL-METIL-SULFETO', 'PENTIL-PROPIL-SULFETO', 'DISSULFETO DE BUTILO', 'Di-n-BUTILAMINA', 'DIISOBUTILAMINA', 'n-OCTILAMINA', 'TETRAETILENOPENTAMINA', 'OCTAMETILCICLOTETRASILOXANO', 'ANIDRIDO TRIMELÍTICO', 'DISOCIANATO DE TOLUENO', 'ISOQUINOLINA', 'QUINOLINE', '8-HIDROXIQUINOLINA', 'INDENE', '2-METILBENZOFURANO', 'INDANE', 'ds-PROPENILBENZENO', 'trans-PROPENILBENZENO', 'alfa-METILESTIRENO', 'm-METILESTIRENO', 'o-METILESTIRENO', 'p-METILESTIRENO', 'ACETATO DE BENZILA', 'BENZOATO DE ETILA', 'ETIL BANILINA', '#NOME?', 'CUMENE', 'METILOILUENO', '0-ELTILTOLUENO', 'PETILTOLUENO', 'MESITYLENE', 'n-PROPILBENZENO', '1.2.3-TRMMETILBENZENO', '1.24-TRIMETILBENZENO', 'BENZILETILETRA', '2-FENIL-2-PROPANOL', 'HIDROPERÓXIDO CUMENI', 'ISOFORONA', 'TRIACETATO de glicerila', '1-NONYNE', 'ÁCIDO AZOLÁICO', 'BUTILCICLOPENTANO', 'cis,cis-1.3,5-TRIMETILCICLOHEXANO', 'ds, trans-1,3.5-TRIMETILCICLOHEXANO', 'SSOPROPILCICLOHEXANO', '1-NONENO', '0PROPILCICLOHEXANO', 'DISOBUTIL CETONA', '1-NÃO-', 'n-BUTILVALERATO', 'ÁCIDO n-NONANOICO', 'n-FORMATO DE OCTILO', '3.3-DIETILPENTANO', '1.2-DIMETIL-3-ETILPENTANO', 'B-ETIL-2.3-DIMETILPENTANO', '2.4-DIMETIL-3-ETILPENTANO', '2.2-DIMETILHEPTANO', '2.6-DIMETILHEPTANO', 'METILHEPTANO', '4-ETILHÉPTANO', '2.3-DIMETILHEPTANO', '2.4-DIMETILHEPTANO', '2.5-DIMETILHEPTANO', '4-DIMETILHEPTANO', '3.5-DIMETILHEPTANO', '4-DIMETILHEPTANO', '3-ETIL-2-METILHEXANO', '4-ETIL-2-METILHEXANO', '3-ETIL-3-METILHEXANO', 'HETIL-4-METILHEXANO', '223-TRIMETILHEXANO', '22.4-TRIMETILHEXANO', '23.3-TRIMETILHEXANO', '2,3,4-TRIMETILHEXANO', '2.3.5-TRIME TILHEXANO', '2.4.4-TRIME TILHEXANO', '3.3.4-TRIME TILHEXANO', '2-METILOCTANO', '3-

METILOCTANO', '4-METILOCTANO', 'n-NONANE', '2233-TETRAMETILPENTANO', '2234-TETRAMETILPENTANO', '2.2.4.4-TETRAMETILPENTANO', '2.3.3.4-TETRAMETILPENTANO', '2.2.5-TRIMETILHEXANO', '2.6-DIMETIL-4-HEPTANOL', '1-NONANOL', '2-NONANOL', 'n-NONYL MERCAPTAN', 'BUTIL-PENTIL-SULFETO', 'ETIL-HEPTIL-SULFETO', 'HEXIL-PROPIL-SULFETO', 'METIL-OCTIL-SULFETO', 'n-NONILAMINA', 'TRIPROPILAMINA', 'PYROMELLITICACID', '1-BRONOFTALENO', '1-CLORONAFTALENO', 'NAFTALINA', 'AZULENO', 'QUINALDINA', 'm-DIVINILBENZENO', '1-METILINDENO', '2-METILINDENO', 'DIMETILFTALATO', 'TEREFTALATO de DIMETILO', 'DICICLOPENTADIENO', '12.3.4-TETRAHYORONAPHTHALENE', 'ANETHOLE', 'MALEATO DE DIALIL', 'n-BUTILBENZENO', 'sec-BUTILBENZENO', 'tert-BUTILBENZENO', '1.2.3.4-TETRAMETILBENZENO', 'm-CIMENO', 'o-CIMENO', 'p-CIMENO', 'm-DIETILBENZENO', 'O-DIETILBENZENO', 'p-OISETILBENZENO', '2ETIL-M-XILENO', '2-ETIL-p-XILENO', '3-ETIL-XILENO', '4-ETIL-m-XILENO', '4-ETIL-0-XILENO', '5-ETIL-m-XILENO', 'ISOBUTILBENZENO', '1.2.3.5-TETRAMETILBENZENO', '1.2.4.5-TETRAMETILBENZENO', 'p-tert-BUTILFENOL', 'p-tert-BUTILCATECOL', 'N.N-DIETILANILINA', '2.6-DIETILANILINA', 'CAMPHENE', 'D-UMONENO', 'alfa-FELANDANDRONO', 'beta-FELANDRENO', 'alfa-PINENE', 'beta-PINENE', 'alfa-TERPINENO', 'gama-TERPINENO', 'TERPINOLENO', 'CÂNFORA', '1-DECYNE', 'cis-DECAHYDRONANPHTHALENE', 'rans-DECAHIDRONAFTALENO', 'ÁCIDO SEBÁCICO', 'in-BUTILCICLOHEXANO', '1-CICLOPENTILPENTANO', '1-DECENO', '1-DECANAL', 'ÁCIDO n-DECANÓICO', '2ETHYLHEXYL ACETATE', 'ISOVALERATO de SOPENTIL', 'n-DECANE', '2-METILNONANO', '13-METILNONANO', '4-METILNONANO', '5-METILNONANO', '3-ETILOCTANO', '4-ETILOCTANO', '2.2-DIMETILOCTANO', '23-DIMETILOCTANO', '2.4-DIMETILOCTANO', '2.5-DIMETILOCTANO', '2.6-DIMETILOCTANO', '2.7-DIMETILOCTANO', '3.3-DIMETILOCTANO', '3.4-DIMETILOCTANO', '3.5-DIMETILOCTANO', '3.6-DIMETILOCTANO', '4.4-DIMETILOCTANO', '4.5-DIMETILOCTANO', '4-PROPYLHEPTANE', '4-ISOPROPYLHEPTANE', '3-ETIL-2-METILHEPTANO', '4-ETIL-2-METILHEPTANO', '5-ETIL-2-METILHEPTANO', '3-ETIL-3-METILHEPTANO', '4-ETIL-3-METILHEPTANO', '3-ETIL-5-METILHEPTANO', 'H-ETIL-4-METILHEPTANO', '4-ETIL-4-METILHEPTANO', '2.23-TRIMETILHEPTANO', '22.4-TRIMETILHEPTANO', '2.2.5-TRIMETILHEPTANO', '2.2.6-TRIMETILHEPTANO', '2.3.3-TRIMETILHEPTANO', '2.3.4-TRIMETHYLHEPTANE', '2.3.5-TRIMETILHEPTANO', '2.3.6-TRIMETILHEPTANO', '2.4.4-TRIMETILHEPTANO', '2.4.5-TRIMETILHEPTANO', '2.4.6-TRIMETILHEPTANO', '2.5.5-TRIME THYLHEPTANE', '1.3.4-TRIME THYLHEPTAN', '3.3.5-TRIME THYLHEPTANE', '3.4.4-TRIMETILHEPTANO', '34.5-TRIMETILHEPTANO', 'H-ISOPROPIL-2-METILHEXANO', '3.3-DIETILHEXANO', '3.4-DIETILHEXANO', '3-ETIL-2.2-DIMETILHEXANI', '4-ETIL-2.2-DIMETILHEXANO', '3-ETIL-2.3-DIMETILHEXANO', '4-ETIL-2.3-DIMETILHEXANO', '3-ETIL-2.4-DIMETILHEXANO', '4-ETIL-2.4-DIMETILHEXANO', '3-ETIL-25-DIMETILHEXANO', '4-ETIL-3.3-DIMETILHEXANO', '3-ETIL-3.4-DIMETILHEXANO', '2.2.3.3-TETRAMETILHEXANO', '2.2.3.4-TETRAMETILHEXANO', '2.2.3.5-TETRAMETILHEXANO', '2.2.4.4-TETRADEO TILHEXANO', '2.2.4.5-TETRADEO TILHEXANO', '2.2.5.5-TETRAMETILHEXANO', '2.3.3.4-TETRAMETILHEXANO', '2.3.3.5-TETRAMETILHEXANO', '2.3.4.4-TETRAMETILHEXANO', '2.3.4.5-TETRAMETILHEXANO', '33.4.4-TETRAMETILHEXANO', '24-DIMETIL-3-ISOPROPILPENTANO', '3.3-DIETIL-2-METILPENTANO', 'HETIL-223-TRIMETILPENTANO', '3-ETIL-224-TRIMETILPENTANO', '3-ETIL-23.4-TRIMETILPENTANO', '2.2.3.3.4-PENTAMETILPENTANO', '2.2.3.4.4-PENTAMETILPENTANO', '1-DECANOL', 'DI-n-PENTYL ETHER', 'ISODECANOL', 'ÉTER DIMETÍLICO TETRAETILENOGLICOL', 'h-DECILMERCAPTANO', 'BUTIL-HEXIL-SULFETO', 'ETIL-OCTIL-SULFETO', 'HEPTIL-PROPIL-SULFETO', 'METIL-NONIL-SULFETO', 'PENTYL-SULFETO', 'PENTYL-DISULFETO', 'n-DEICILAMINA', '1-METILNAFTALENO', '2-METILNAFTALENO', 'H-BUTILBENZOATO', 'n-PENTYLBENZENO', 'p-tert-AMILFENOL', '1-UNDECYNE', '2-ETILHEXILO ACRILATO', '1-UNDECENE', '1-CICLOPENTILHEXANO', 'PENTYLCYCLOHEXANE', '1-UNDECANAL', '6-UNDECANE', '1-UNDECANOL', 'MERCAPTANO UNDECILO', 'BUTIL-HEPTIL-SULFETO', 'ÉCIL-METIL-SULFETO', 'ETIL-NONIL-SULFETO', 'OCTIL-PROPIL-SULFETO', 'DIBENZOFURANO', 'DIBENZOPIROL', 'ACENAFTENO', 'BIFENIL', 'DIFENIL ETHER', 'p-AMINODIFENIL', 'DIFENILAMINA', 'D-AMINOAZOBENZENO', '1.3-OIPHENYLTRIAZEN', '1.2-DIMETILNAFTALENO', '1.3-DIMETILNAFTALENO', '1.4-DIMETILNAFTALENO', '1,5-DIMETILNAFTALENO', '1,6-DIMETILNAFTALENO', '1,7-OIMETILNAFTALENO', '3-DIMETILNAFTALENO', '1.6-DIMETILNAFTALENO', '2.7-DIMETILNAFTALENO', '1-ELILNAFTALENO', '2-ELTILNAFTALENO', 'p-AMINODIFENILAMINA', 'HIDRAZOBENZENO', '1.2.3-TRIMETILINDENO', 'FTALATO DE DIETIL', 'CICLOHEXILBENZENO', 'm-

DRISOPROPILBENZENI', 'p-DIISOPROPILBENZENO', 'n-HEXILOBENZENO', '1.2.3-
 TRIETILBENZENO', '1.2.4-TRIEILBENZENO', '1.3.5-TRIEILBENZENO',
 'HEXAMETILBENZENO', 'DIBUTILMALEATO', 'BICICLOHEXIL', '1-DODECYNE',
 'DICICLOHEXILAMINA', '1-DODECENO', '1-CICLOPENTILÉPTANO', '1-CICLOHEXILHEXANO',
 '1-DODECANAL', 'n-ÁCIDO DODANCICÁSCIO', 'n-DODECANO', 'DI-n-HEXYL ETHER', '1-
 DODECANOL', 'DIETILENOGLICOL DI-n-BUTILO ÉFER', 'In-DODECYL MERCAPTAN', 'BUTIL-
 OCTIL-SULFETO', 'DECIL-ETIL-SULFETO', 'HEXIL-SULFETO', 'METIL-UNDECIL-SULFETO',
 'SULFETO DE NONIL-PROPILO', 'HEXIL-DISULFETO', 'DODECILAMINA', 'TRI-n-
 BASTILAMINA', 'FLUORENE', 'BENZOFENONA', 'DIFENILMETANO', '1-PROPILNAFTALENO',
 '2.PROPYLNAPHTHALENE', '2ETIL-J-METILNAFTALENO', '2ETIL-6-METILNAFTALENO', '2ETIL-
 7-METILNAFTALENO', 'n-HEPTYLBENZENO', '1-TRIDECYNE', '1-RIDECINO', '1-
 CICLOPENTIOCTANO', '1-CICLOHEXILHETANO', '1-TRIDECANAL', 'NONANOATO de n-BUTILO',
 'DODECANCATO de metilo', 'n-TRIDECANE', '1-TRIDECANOL', 'BUTIL-NONIL-SULFETO',
 'DECIL-PROPIL-SULFETO', 'DODECIL-METIL-SULFETO', 'ETIL-UNDECIL-SULFETO', '1-
 TRIDECANETHIOL', 'ANTHRAQUINONE', 'ANTRACENO', 'DIFENILACETILO', 'FEANTRENO',
 'cis-STILBENE', 'trans-STILBENE', 'BENZOATO DE BENZILA', '1.1-DIFENILETANO', '1.2-
 DIFENILETANO', 'DIBENZIL ETHER', '1-n-BUTILNAFTALENO', '2-BUTILNAFTALENO', 'n-
 OCTILBENZENO', '1,2,3.4-TETRAETILBENZENO', '1.2.3.5-TETELBENZENO', '1.2.4.5-
 TERATILOBENZENO', 'p-tert-OCTILFENOL', '1-TETRADECENO', '1-CICLOPENTILNONANO', '1-
 CICLOHEXILOCTANO', 'n-TETRADECANÓICO ÁCIDO', 'n-TETRADECANE', '1-TETRADECANOL',
 'BUTIL-DECIL-SULFETO', 'DODECIL-ETIL-SULFETO', 'HEPTIL-SULFETO', 'METIL-TRIDECIL-
 SULFETO', 'PROPIL-UNDECIL-SULFETO', '1-TETRADECANETIOL', 'HEPTIL-DISULFETO',
 'TETRADECILAMINA', 'DIFENILMETANO-4,4''-DIISOCIANATO', 'e-CUMYLPHENCL', 'BISFENOL
 A', '1-PENTYLNAPHTHALENE', '2-PENTYLNAPHTHALENE', 'n-NONILBENZENO', '2.6-DI-art-
 BUTIL-p-CRESOL', 'NONILFENOL', '1-PENTADECYNE', '1-PENTADECENO', '1-
 CICLOPENTILDECANO', '1-CICLOHEXILNONANO', 'PENTADECANOICACI', 'n-PENTADECANO', '1-
 PENTADECANOL', 'BUTIL-UNDECIL-SULFETO', 'DODECIL-PROPIL-SULFETO', 'ETIL-TRIDECIL-
 SULFETO', 'METIL-TETRADECIL-SULFETO', '1-PENTADECANETIOL', 'FLUORANTENO',
 'PIRENO', '1-FEFENILNAFTALENO', '1.n-HEXILNAFTALENO', 'FTALATO DE DIFUTILO', 'n-
 DECILBENZENO', 'PENTAETILBENZENO', '1-HEXADECYNE', 'In-DECILCICLOHEXANO', '1-
 CICLOPENTILUNDECANO', '1-HEXADECENO', 'ÁCIDO HEXADECANÓICO', 'n-HEXADECANO', 'DI-
 n-OCTYLETHER', '1-HEXADECANOL', 'BUTIL-DODECIL-SULFETO', 'ETIL-TETRADECIL-
 SULFETO', 'METIL-PENTADECIL-SULFETO', 'SULFETO DE OCTILA', 'PROPIL-TRIDECIL-
 SULFETO', '1-HEXADECANETIOL', 'OCTYL-DISULFETO', 'n-UNDECILBENZENO', '1-
 HEPTADECYNE', '#NOME?', '1-CICLOHEXILUNDECANO', '1-HEPTADECENO', 'n-HEPTADECANE',
 '1-HEPTADECANOL', 'BUTIL-TRIDECIL-SULFETO', 'ETIL-PENTADECIL-SULFETO', 'HEXADECIL-
 METIL-SULFETO', 'PROPIL-TETRADECIL-SULFÍDEO', '1-HEPTADECANETHI', 'CRISÊNIO', 'm-
 TERFENIL', 'e-TERFENIL', 'e-TERFENIL', 'TRIFENILFOSFINA', 'NN-DIFENIL-
 OFENILENODIAMINA', '2.3-DIMETIL-2.3-DIFENILBUTANO', 'PERÓXIDO DE DICULILA', 'n-
 DODECILBENZENO', 'HEXAETILBENZENO', 'LINOLEICACI', '1-OCTADECYNE', 'ÁCIDO OLEICO',
 'SEBACATO de DIBUTILO', 'DIHEXYLADIPA', '1-CICOPENTILTRIDECANO', '1-
 CICLOHEXILDODECANO', '1-OCATEDECENO', 'ÁCIDO ESTESCÓICO', 'n-OCTADECANO', 'DINONYL
 ETHER', '1-OCTADECANOL', 'BUTIL-TETRADECIL-SULFETO', 'ETIL-HEXADECIL-SULFETO',
 'HEPTACOCIL-METIL-SULFETO', 'NONIL-SULFETO', 'PENTADECIL-PROPIL-SULFETO', '1-
 OCTADECANETIOL', 'DISSULFETO DE NONILO', '1-n-NONYLNAPHTHALENS', 'e-
 TRIDECILBENZENO', '1-NONADECYNE', 'OLEATO DE METILA', '1-CYCLOPENTYLTETRADECANE',
 '1-CICLOHEXILTRIDECANO', '1-NONADECENO', 'ÁCIDO NONADECANCIC', 'n-NONADECANE', '1-
 NONADECANOL', 'BUTIL-PENTADECIL-SULFETO', 'ETIL-HEPTADECIL-SULFETO', 'HEXADECIL-
 PROPIL-SULFETO', 'METIL-OCTADECIL-SULFETO', '1-NONADECANETHIOL', 'TRIFENILETHYY
 ENE', '1-n-DECILNAFTALENO', 'ÁCIDO ABIÉTICO', 'DEHIDROABIETILAMINA', '1-
 FENILTETRADECANE', '1-EICOSYNE', '#NOME?', '1-CICLOHEXILTETRADECANE', '1-
 EICOSENO', 'n-EICOSANO', '1-EICOSANOL', 'BUTIL-HEXADECIL-SULFETO', 'DECILO-
 SULFETO', 'ETIL-OCTADECIL-SULFETO', 'EPTADECIL-PROPIL-SULFETO', 'METIL-NONADECIL-
 SU', '1-EICOSÂNETICA', 'DECIL-DISULFETO', 'FENILPENTADECANO', '1-
 CICLOPENTILHEXADECANO', '1-CICLOHEXILPENTADECANO', '1-FENILHEXADECANO', '1-
 CICLOHEXILHEXADECANO', 'n-BUTYL STEARATE', 'FTALATO DE DISOOCTIL', 'FTALATO DE
 DIOCTIL', 'DINONILFENOL', 'TETRAFENILETILENO'};

app.CompostoDropDown.Editable = 'on';
 app.CompostoDropDown.BackgroundColor = [1 1 1];

```

app.CompostoDropDown.Position = [115 134 264 22];
app.CompostoDropDown.Value = 'BROMOCLORODIFLUOROMETANO';

% Create JgmoLLabel
app.JgmoLLabel = uilabel(app.UIFigure);
app.JgmoLLabel.FontSize = 18;
app.JgmoLLabel.FontWeight = 'bold';
app.JgmoLLabel.Position = [868 566 68 23];
app.JgmoLLabel.Text = 'J/g.mol';

% Create Image
app.Image = uiimage(app.UIFigure);
app.Image.Position = [40 585 86 87];
app.Image.ImageSource = fullfile(pathToMLAPP, 'Utfpr.gif');

% Create MostrartodatabelaButton
app.MostrartodatabelaButton = uibutton(app.UIFigure, 'push');
app.MostrartodatabelaButton.ButtonPushedFcn = createCallbackFcn(app,
@MostrartodatabelaButtonPushed, true);
app.MostrartodatabelaButton.Position = [636 134 118 23];
app.MostrartodatabelaButton.Text = 'Mostrar toda tabela';

% Create SelecionarestecompostoecalcularHButton
app.SelecionarestecompostoecalcularHButton = uibutton(app.UIFigure,
'push');
app.SelecionarestecompostoecalcularHButton.ButtonPushedFcn =
createCallbackFcn(app, @SelecionarestecompostoecalcularHButtonPushed, true);
app.SelecionarestecompostoecalcularHButton.Position = [391 134 233
23];
app.SelecionarestecompostoecalcularHButton.Text = 'Selecionar este
composto e calcular  $\Delta H$  ';

% Create ObservaoApressonoLabel
app.ObservaoApressonoLabel = uilabel(app.UIFigure);
app.ObservaoApressonoLabel.FontName = 'Arial';
app.ObservaoApressonoLabel.FontWeight = 'bold';
app.ObservaoApressonoLabel.Position = [52 429 917 22];
app.ObservaoApressonoLabel.Text = 'Observação: A pressão do processo
deve ser constante e as temperaturas máximas e mínimas respeitadas para que os
cálculos obtidos sejam verdadeiros';

% Create ObservaoApressonoLabel_2
app.ObservaoApressonoLabel_2 = uilabel(app.UIFigure);
app.ObservaoApressonoLabel_2.FontName = 'Arial';
app.ObservaoApressonoLabel_2.FontSize = 10;
app.ObservaoApressonoLabel_2.FontWeight = 'bold';
app.ObservaoApressonoLabel_2.Position = [50 75 402 22];
app.ObservaoApressonoLabel_2.Text = 'Trabalho desenvolvido por Matheus
Augusto Milek e Matheus dos Santos Macedo';

% Create ObservaoApressonoLabel_3
app.ObservaoApressonoLabel_3 = uilabel(app.UIFigure);
app.ObservaoApressonoLabel_3.FontName = 'Arial';
app.ObservaoApressonoLabel_3.FontSize = 10;
app.ObservaoApressonoLabel_3.FontWeight = 'bold';
app.ObservaoApressonoLabel_3.Position = [50 45 581 22];
app.ObservaoApressonoLabel_3.Text = 'Banca de Defesa: César Augusto
Canciam (orientador), Ewerton Moraes Mattos e Thiago Peixoto de Araújo (membros)';

```

```

% Create ObservaoApressonoLabel_4
app.ObservaoApressonoLabel_4 = uilabel(app.UIFigure);
app.ObservaoApressonoLabel_4.FontName = 'Arial';
app.ObservaoApressonoLabel_4.FontSize = 10;
app.ObservaoApressonoLabel_4.FontWeight = 'bold';
app.ObservaoApressonoLabel_4.Position = [51 16 200 22];
app.ObservaoApressonoLabel_4.Text = 'Data de defesa: 16 de Novembro de
2022';

% Create ObservaoApressonoLabel_5
app.ObservaoApressonoLabel_5 = uilabel(app.UIFigure);
app.ObservaoApressonoLabel_5.FontName = 'Arial';
app.ObservaoApressonoLabel_5.FontSize = 10;
app.ObservaoApressonoLabel_5.FontWeight = 'bold';
app.ObservaoApressonoLabel_5.Position = [328 16 148 22];
app.ObservaoApressonoLabel_5.Text = 'UTFPR Câmpus Ponta Grossa';

% Create JgmolLabel_2
app.JgmolLabel_2 = uilabel(app.UIFigure);
app.JgmolLabel_2.FontSize = 18;
app.JgmolLabel_2.FontWeight = 'bold';
app.JgmolLabel_2.Position = [869 523 68 23];
app.JgmolLabel_2.Text = 'J/g.mol';

% Create H2Label
app.H2Label = uilabel(app.UIFigure);
app.H2Label.HorizontalAlignment = 'right';
app.H2Label.FontName = 'Arial';
app.H2Label.FontSize = 18;
app.H2Label.FontWeight = 'bold';
app.H2Label.Position = [684 523 41 23];
app.H2Label.Text = ' $\Delta H_2$ ';

% Create Entalpia_2
app.Entalpia_2 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.Entalpia_2.ValueDisplayFormat = '%.3f';
app.Entalpia_2.FontName = 'Arial';
app.Entalpia_2.FontSize = 18;
app.Entalpia_2.FontWeight = 'bold';
app.Entalpia_2.Position = [732 522 100 24];

% Create TInicial_2
app.TInicial_2 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TInicial_2.FontWeight = 'bold';
app.TInicial_2.Position = [209 523 120 22];

% Create FinalKLabel_2
app.FinalKLabel_2 = uilabel(app.UIFigure);
app.FinalKLabel_2.HorizontalAlignment = 'right';
app.FinalKLabel_2.FontWeight = 'bold';
app.FinalKLabel_2.Position = [391 523 138 22];
app.FinalKLabel_2.Text = 'Temperatura Final 2 (K)';

% Create TFinal_2
app.TFinal_2 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TFinal_2.FontWeight = 'bold';
app.TFinal_2.Position = [547 523 108 22];

% Create JgmolLabel_3

```



```

app.JgmolLabel_3 = uilabel(app.UIFigure);
app.JgmolLabel_3.FontSize = 18;
app.JgmolLabel_3.FontWeight = 'bold';
app.JgmolLabel_3.Position = [869 478 68 23];
app.JgmolLabel_3.Text = 'J/g.mol';

% Create H3Label
app.H3Label = uilabel(app.UIFigure);
app.H3Label.HorizontalAlignment = 'right';
app.H3Label.FontName = 'Arial';
app.H3Label.FontSize = 18;
app.H3Label.FontWeight = 'bold';
app.H3Label.Position = [684 478 41 23];
app.H3Label.Text = ' $\Delta H_3$ ';

% Create Entalpia_3
app.Entalpia_3 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.Entalpia_3.ValueDisplayFormat = '%.3f';
app.Entalpia_3.FontName = 'Arial';
app.Entalpia_3.FontSize = 18;
app.Entalpia_3.FontWeight = 'bold';
app.Entalpia_3.Position = [732 477 100 24];

% Create InicialKLabel_3
app.InicialKLabel_3 = uilabel(app.UIFigure);
app.InicialKLabel_3.HorizontalAlignment = 'right';
app.InicialKLabel_3.FontWeight = 'bold';
app.InicialKLabel_3.Position = [49 477 144 22];
app.InicialKLabel_3.Text = 'Temperatura Inicial 3 (K)';

% Create TInicial_3
app.TInicial_3 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TInicial_3.FontWeight = 'bold';
app.TInicial_3.Position = [208 477 121 22];

% Create FinalKLabel_3
app.FinalKLabel_3 = uilabel(app.UIFigure);
app.FinalKLabel_3.HorizontalAlignment = 'right';
app.FinalKLabel_3.FontWeight = 'bold';
app.FinalKLabel_3.Position = [391 477 138 22];
app.FinalKLabel_3.Text = 'Temperatura Final 3 (K)';

% Create TFinal_3
app.TFinal_3 = uieditfield(app.UIFigure, 'numeric');
app.TFinal_3.FontWeight = 'bold';
app.TFinal_3.Position = [547 477 108 22];

% Create InicialKLabel_4
app.InicialKLabel_4 = uilabel(app.UIFigure);
app.InicialKLabel_4.HorizontalAlignment = 'right';
app.InicialKLabel_4.FontWeight = 'bold';
app.InicialKLabel_4.Position = [49 523 144 22];
app.InicialKLabel_4.Text = 'Temperatura Inicial 2 (K)';

% Create FonteYAWS1999Label
app.FonteYAWS1999Label = uilabel(app.UIFigure);
app.FonteYAWS1999Label.Position = [829 135 110 22];
app.FonteYAWS1999Label.Text = 'Fonte: YAWS, 1999';

```

```

        % Show the figure after all components are created
        app UIFigure.Visible = 'on';
    end
end

% App creation and deletion
methods (Access = public)

    % Construct app
    function app = app1

        % Create UIFigure and components
        createComponents(app)

        % Register the app with App Designer
        registerApp(app, app UIFigure)

        if nargin == 0
            clear app
        end
    end

    % Code that executes before app deletion
    function delete(app)

        % Delete UIFigure when app is deleted
        delete(app UIFigure)
    end
end
end
end

```

APÊNDICE 3 – Termo de doação

Os autores do trabalho, Matheus Augusto Milek e Matheus dos Santos Macedo, em comum consenso, concedem por meio deste termo, o direito de uso de todos os componentes deste trabalho à Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), para uso por parte de discentes e docentes.

Ponta Grossa, 16 de Novembro de 2022