EIEL D4	T((6)	0(1 (110)
FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
0	0.0012	0.002496004
1	0.0026	0.005408045
2	0.0038	0.007904141
3	0.0036	0.00748812
4	0.0035	0.00728011
5	0.0045	0.009360234
6	0.002	0.004160021
7	0.0016	0.003328011
8	0.0034	0.007072101
9	0.003	0.006240069
10	0.0032	0.006656084
11	0.0016	0.003328011
12	0.0039	0.008112152
13	0.0039	0.008112152
14	0.0024	0.004992036
15	0.0032	0.006656084
16	0.0017	0.003536013
17	0.0041	0.008528177
18	0.0011	0.002288003
19	0.0047	0.009776267
20	0.0077	0.016017173
21	0.0051	0.010608341
22	0.0062	0.012896613
23	0.0063	0.013104643
24	0.0088	0.018305751
25	0.0077	0.016017173
26	0.0051	0.010608341
27	0.0091	0.018929937
28	0.0059	0.012272528
29	0.0062	0.012896613
30	0.0068	0.014144808
31	0.0083	0.017265469
32	0.0054	0.011232405
33	0.0092	0.019138001

FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
34	0.0068	0.014144808
35	0.02	0.04162056
36	0.084	0.176243249
37	0.015	0.031208674
38	0.019	0.039537628
39	0.015	0.031208674
40	0.049	0.102222358
41	0.045	0.093834191
42	0.045	0.093834191
43	0.038	0.079181021
44	0.052	0.108521363
45	0.088	0.184791383
46	0.041	0.085457127
47	0.059	0.123247824
48	0.064	0.13379371
49	0.072	0.150719247
50	0.054	0.112724682
51	0.028	0.058296417
52	0.016	0.033290527
53	0.062	0.129572503
54	0.068	0.14224809
55	0.023	0.047871269
56	0.038	0.079181021
57	0.093	0.195507197
58	0.015	0.031208674
59	0.023	0.047871269
60	0.024	0.049955528
61	0.033	0.068732358
62	0.015	0.031208674
63	0.061	0.127463341
64	0.061	0.127463341
65	0.082	0.171977016
66	0.033	0.068732358
67	0.082	0.171977016

68 0.066 0.138018865 69 0.084 0.176243249 70 0.087 0.182652353 71 0.028 0.058296417 72 0.097 0.20410557 73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08	FIEL D1	T(V)	C(mal/maal/()
69 0.084 0.176243249 70 0.087 0.182652353 71 0.028 0.058296417 72 0.097 0.20410557 73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.03537628 89 0.017 0.03537628 90 0.08 0.16771584 91 0.091 <td>FIELD1</td> <td>T(K)</td> <td>C(mJ /mol-K)</td>	FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
70 0.087 0.182652353 71 0.028 0.058296417 72 0.097 0.20410557 73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059<			
71 0.028 0.058296417 72 0.097 0.20410557 73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047<		0.084	
72 0.097 0.20410557 73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.03537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 </td <td>70</td> <td>0.087</td> <td>0.182652353</td>	70	0.087	0.182652353
73 0.084 0.176243249 74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026	71	0.028	0.058296417
74 0.059 0.123247824 75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089<	72	0.097	0.20410557
75 0.045 0.093834191 76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 </td <td>73</td> <td>0.084</td> <td>0.176243249</td>	73	0.084	0.176243249
76 0.064 0.13379371 77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 <td>74</td> <td>0.059</td> <td>0.123247824</td>	74	0.059	0.123247824
77 0.054 0.112724682 78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 <td>75</td> <td>0.045</td> <td>0.093834191</td>	75	0.045	0.093834191
78 0.033 0.068732358 79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 </td <td>76</td> <td>0.064</td> <td>0.13379371</td>	76	0.064	0.13379371
79 0.056 0.116931333 80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	77	0.054	0.112724682
80 0.084 0.176243249 81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	78	0.033	0.068732358
81 0.011 0.022883421 82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	79	0.056	0.116931333
82 0.066 0.138018865 83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	80	0.084	0.176243249
83 0.028 0.058296417 84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	81	0.011	0.022883421
84 0.032 0.066644214 85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	82	0.066	0.138018865
85 0.071 0.148599831 86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	83	0.028	0.058296417
86 0.027 0.056210585 87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	84	0.032	0.066644214
87 0.039 0.08127245 88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	85	0.071	0.148599831
88 0.019 0.039537628 89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	86	0.027	0.056210585
89 0.017 0.035372626 90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	87	0.039	0.08127245
90 0.08 0.16771584 91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	88	0.019	0.039537628
91 0.091 0.191216677 92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	89	0.017	0.035372626
92 0.059 0.123247824 93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	90	0.08	0.16771584
93 0.047 0.098026825 94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	91	0.091	0.191216677
94 0.075 0.157084219 95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	92	0.059	0.123247824
95 0.026 0.05412517 96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	93	0.047	0.098026825
96 0.089 0.18693177 97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	94	0.075	0.157084219
97 0.049 0.102222358 98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	95	0.026	0.05412517
98 0.08 0.16771584 99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	96	0.089	0.18693177
99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	97	0.049	0.102222358
99 0.098 0.206258863 100 0.037 0.077090178	98	0.08	0.16771584
100 0.037 0.077090178	99	0.098	
101 0.075 0.157084219	100	0.037	
1 . 0. 1 0.0, 0 1 0.10, 00-7213	101	0.075	0.157084219

		T
FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
102	0.061	0.127463341
103	0.077	0.16133329
104	0.045	0.093834191
105	0.024	0.049955528
106	0.045	0.093834191
107	0.038	0.079181021
108	0.097	0.20410557
109	0.062	0.129572503
110	0.036	0.074999906
111	0.084	0.176243249
112	0.03	0.06246939
113	0.05	0.10432125
114	0.096	0.201953772
115	0.03	0.06246939
116	0.052	0.108521363
117	0.029	0.06038268
118	0.077	0.16133329
119	0.039	0.08127245
120	0.027	0.056210585
121	0.058	0.121141438
122	0.019	0.039537628
123	0.096	0.201953772
124	0.044	0.091738923
125	0.011	0.022883421
126	0.064	0.13379371
127	0.023	0.047871269
128	0.096	0.201953772
129	0.056	0.116931333
130	0.079	0.16558711
131	0.085	0.178378301
132	0.018	0.037454988
133	0.016	0.033290527
134	0.086	0.180514664
135	0.87	3.50195271
	•	

FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
136	0.79	2.91031023
137	0.79	0.56015625
138	0.41	1.02992697
139	0.25	0.56015625
140	0.73	2.51817369
141	0.85	3.34630125
142	0.15	0.32067375
143	0.56	1.61613312
144	0.8	2.97984
145	0.71	2.39663127
146	0.38	0.93142104
147	0.91	3.82947747
148	0.73	2.51817369
149	0.88	3.58178304
150	0.7	2.33751
151	0.5	1.36125
152	0.26	0.58597032
153	0.15	0.32067375
154	0.53	1.48501389
155	0.87	3.50195271
156	0.77	2.77488981
157	0.71	2.39663127
158	0.8	2.97984
159	0.74	2.58062568
160	0.98	4.45726344
161	0.64	2.00491008
162	0.81	3.05060337
163	0.51	1.40171307
164	0.36	0.86870592
165	0.57	1.66154601
166	0.93	4.00159749
167	0.21	0.46060077
168	0.94	4.08980088
169	0.13	0.27604629
	0.10	0.27004029

FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
170	0.64	2.00491008
171	0.86	3.42346392
172	0.12	0.25404096
173	0.1	0.21057
174	0.47	1.24442511
175	0.84	3.27044928
176	0.33	0.77875809
177	0.55	1.57158375
178	0.82	3.12261576
179	0.33	0.77875809
180	0.53	1.48501389
181	0.25	0.56015625
182	0.85	3.34630125
183	0.15	0.32067375
184	0.55	1.57158375
185	0.15	0.32067375
186	0.7	2.33751
187	0.35	0.83818875
188	0.29	0.66587973
189	0.76	2.70896832
190	0.53	1.48501389
191	0.3	0.69339
192	0.69	2.27946813
193	0.96	4.27057152
194	0.98	4.45726344
195	0.43	1.09873299
196	0.72	2.45684736
197	0.55	1.57158375
198	0.1	0.21057
199	0.25	0.56015625
200	0.78	2.84199864
201	0.33	0.77875809
202	0.79	2.91031023
203	0.48	1.28262144

FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
204	0.39	0.96364983
205	0.79	2.91031023
206	0.29	0.66587973
207	0.44	1.13412288
208	0.23	0.50966919
209	0.98	4.45726344
210	0.19	0.41282763
211	0.78	2.84199864
212	0.3	0.69339
213	0.41	1.02992697
214	0.31	0.72136287
215	0.88	3.58178304
216	0.46	1.20695352
217	0.64	2.00491008
218	0.48	1.28262144
219	0.94	4.08980088
220	0.21	0.46060077
221	0.95	4.17945375
222	0.15	0.32067375
223	0.39	0.96364983
224	0.69	2.27946813
225	0.71	2.39663127
226	0.85	3.34630125
227	0.41	1.02992697
228	0.98	4.45726344
229	0.9	3.74553
230	0.68	2.22249024
231	0.32	0.74981376
232	0.15	0.32067375
233	0.32	0.74981376
234	0.54	1.52788248
235	1.86	20.40637992
236	2.13	29.26584429
237	1.24	7.47922368

FIELD1	T(K)	C(mJ /mol-K)
238	1.87	20.69535171
239	2.69	55.62053013
240	1.18	6.67699224
241	1.61	14.07413217
242	2.71	56.78625327
243	2.44	42.40903488
244	2.3	36.05319