

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

E.N.S.I.C. - NANCY

THESE

pour l'obtention du grade de

DOCTEUR

Spécialité : Génie des Procédés

Ecole Doctorale RP2E

Science et Ingénierie des Ressources, Procédés, Produits, Environnement

présentée par

Sylvain TOUCHARD

Sujet :

CONSTRUCTION ET VALIDATION DE MODELES CINETIQUES DETAILLES POUR LA COMBUSTION DE MELANGES MODELES DES ESSENCES

Tome II : Figure et Annexes

Soutenue le 12 octobre 2005 devant la Commission d'Examen composée de :

<i>Président-rapporteur:</i>	M. R. MINETTI	Université d'Artois
<i>Rapporteurs :</i>	M. P. DAGAUT	LCSR, Orléans
<i>Examineurs :</i>	Mme F. BATTIN-LECLERC	DCPR, Nancy
	M T. FARAVELLI	Politecnico di Milano, Italie
	M. R. FOURNET	DCPR, Nancy
	M. P.A. GLAUDE	DCPR, Nancy
<i>Invités :</i>	Mme G. PENGLOAN	PSA PEUGEOT CITROEN
	M. J. DARTOY	TOTAL

ANNEXE I

REACTIONS ET PARAMETRES CINETIQUES

GENERIQUES

Dans cette annexe ont été regroupées toutes les règles de calcul des données cinétiques utilisées par le logiciel EXGAS pour générer automatiquement des mécanismes réactionnels d'oxydation et de pyrolyse pour les alcanes, les alcènes et leurs mélanges. Cette description prend en compte les changements énumérés au chapitre II.

AMORÇAGES UNIMOLECULAIRES

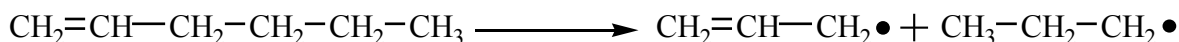


Tableau A-I-1 : Amorçages unimoléculaires considérés par le générateur

	C — C	C — O	C = C	C — H
Alcane	génééré			non génééré
Ether	génééré	génééré		non génééré
Alcène	génééré		non génééré	génééré pour les H allyliques

Les cases grisées représentent les réactifs pour lesquels le type de liaison considérée n'existe pas.

Les paramètres cinétiques sont calculés par le logiciel KINGAS (*Bloch-Michel, 1995*)

AMORÇAGES BIMOLECULAIRES

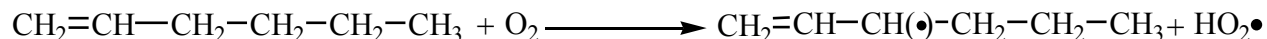


Tableau A-I-2 : Amorçages bimoléculaires considérés par le générateur

Réactif	Oxygène	Alcène
Alcane	génééré	non génééré
Ether	génééré	non génééré
Alcène	génééré	génééré

Tableau A-I-3 : Paramètres cinétiques des amorçages bimoléculaires avec l'oxygène (*Ingham et al., 1994*)

Atome arraché	H primaire			H secondaire			H tertiaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
alkylique	$7,0 \times 10^{12}$	0	kingas	$7,0 \times 10^{12}$	0	kingas	$7,0 \times 10^{12}$	0	kingas
allylique	$7,0 \times 10^{11}$	0	kingas	$7,0 \times 10^{11}$	0	kingas	$7,0 \times 10^{11}$	0	kingas
vinyle	-	-	-	$1,0 \times 10^{13}$	0	57600	$2,0 \times 10^{12}$	0	55600

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

Tableau A-I-4 : Paramètres cinétiques des amorçages bimoléculaires entre deux alcènes (Tsang, 1991 ; Douhou et al., 1994)

Atome arraché	H allylique primaire			H allylique secondaire			H allylique tertiaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
secondaire	$1,6 \times 10^{13}$	0	52300	$3,7 \times 10^{13}$	0	51300	$7,4 \times 10^{12}$	0	49300
tertiaire	$8,3 \times 10^{13}$	0	55200	$1,9 \times 10^{14}$	0	54200	$3,8 \times 10^{13}$	0	52200
quaternaire	$3,3 \times 10^{11}$	0	50000	$7,7 \times 10^{11}$	0	49000	$1,5 \times 10^{11}$	0	47000

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

ADDITION DES RADICAUX SUR LA DOUBLE LIAISON

Tableau A-I-5 : Paramètres cinétiques des réactions d'addition des radicaux sur la double liaison (Tsang, 1991 ; Tsang et Walker, 1992 ; Tsang, 1973 ; Baker et al., 1998)

Radical	C secondaire			C tertiaire			C quaternaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
•H	$1,32 \times 10^{13}$	0	1560	$1,32 \times 10^{13}$	0	3260	$1,20 \times 10^{11}$	0,69	3000
•CH ₃	$1,69 \times 10^{11}$	0	7400	$9,64 \times 10^{10}$	0	8000	$1,58 \times 10^{11}$	0	4970
•C ₂ H ₅ (Rp)	$1,00 \times 10^{11}$	0	7250	Uniquement sur le carbone secondaire					
•iC ₃ H ₇ (Rs)	$1,30 \times 10^{10}$	0	8700	Uniquement sur le carbone secondaire					
•tC ₄ H ₇ (Rt)	$3,10 \times 10^9$	0	5890	Uniquement sur le carbone secondaire					
•OH	$1,37 \times 10^{12}$	0	-1040	$1,37 \times 10^{12}$	0	-1040	$1,37 \times 10^{12}$	0	-1040
•O•	$6,0 \times 10^4$	2,56	-1130	$6,0 \times 10^4$	2,56	-1130	$6,0 \times 10^4$	2,56	-1130

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

Tableau A-I-6 : Paramètres cinétiques des réactions d'addition des radicaux peroxydes sur la double liaison en fonction de la nature des carbones impliqués dans la double liaison (Stark, 1997 et Stark, 2000)

Radical	C ^{IV} =C ^{IV}			C ^{IV} =C ^{III}			C ^{IV} =C ^{II}		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
•OOH	$3,0 \times 10^{11}$	0	7000	$4,0 \times 10^{11}$	0	14200	$8,0 \times 10^{11}$	0	12860
•OOCH ₃	$1,4 \times 10^{11}$	0	8700	$1,5 \times 10^{11}$	0	10140	$4,0 \times 10^{11}$	0	12600
•OOR	$9,0 \times 10^{10}$	0	9770	$1,0 \times 10^{11}$	0	11520	$2,0 \times 10^{11}$	0	13120
Radical	C ^{III} =C ^{III}			C ^{III} =C ^{II}					
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
•OOH	$5,0 \times 10^{11}$	0	12000			$1,0 \times 10^{12}$	0		14200
•OOCH ₃	$2,0 \times 10^{11}$	0	9520			$4,0 \times 10^{11}$	0		11720
•OOR	$4,0 \times 10^{11}$	0	14000			$8,0 \times 10^{11}$	0		16200

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

ADDITIONS DES RADICAUX SUR L'OXYGENE

Le calcul de la constante de vitesse d'addition de O₂ sur les radicaux alkyliques est effectué selon la corrélation suivante :

$$k_{\text{add}} = n_p \cdot k_p + n_s \cdot k_s + n_t \cdot k_t + n_q \cdot k_q,$$

avec :

n_p = nombre de groupes primaires (CH₃) liés à l'atome de carbone portant le point radicalaire,

n_s = nombre de groupes secondaires (CH₂) liés à l'atome de carbone portant le point radicalaire,

n_t = nombre de groupes tertiaires (CH) liés à l'atome de carbone portant le point radicalaire,

n_q = nombre de groupes quaternaires (C) liés à l'atome de carbone portant le point radicalaire,

$$k_p = 8,0 \times 10^{18} \text{ T}^{-2.5} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1},$$

$$k_s = 9,0 \times 10^{18} \text{ T}^{-2.5} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1},$$

$$k_t = 1,5 \times 10^{18} \text{ T}^{-2.5} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1},$$

$$k_q = 1,0 \times 10^{18} \text{ T}^{-2.5} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}.$$

Tableau A-I-7 : Paramètres cinétiques d'addition des radicaux allyliques et vinyliques sur l'oxygène

Radical initial	A	b	E
allylique	$1,2 \times 10^{10}$	0	-2300
vinylique	$2,2 \times 10^{19}$	-2,5	0

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm³, mol, s, cal).

ISOMERISATIONS

Les données cinétiques de ces réactions sont calculées, à partir des méthodes de Benson, par le logiciel KINGAS. O'Neal a proposé une relation approchée (Brocard *et al.*, 1983) qui permet de calculer le facteur préexponentiel :

$$A = e^1 \frac{k_B T}{h} \times rpd \times \exp \left[\frac{(\Delta n_{i,rot}^\ddagger) \times 3,5}{R} \right] s^{-1}$$

e^1 : base des logarithmes népériens = 2,72,

T : température en Kelvin,

rpd : « reaction path degeneracy », nombre d'atomes d'hydrogène transférables,

$\Delta n_{i,rot}^\ddagger$: variation du nombre de rotations internes entre le réactif et le complexe activé,

Les énergies d'activation des processus d'isomérisation sont calculées en faisant la somme de l'énergie d'activation de l'arrachage d'un atome d'hydrogène par un radical R•, RO• ou ROO• et de l'énergie de tension du cycle formé dans l'état de transition :

$$E_a = E_{\text{arr}} + E_{\text{cycle}}$$

Tableau A-I-8 : Energies d'activation de l'arrachage d'un atome d'hydrogène (E_{arr})

	H alkyle			H allyle			H vinyle		H hydroxyle
	Hp	Hs	Ht	Hp	Hs	Ht	Hs	Ht	
R• alkyle	13500	11000	9000	8000	6500	5500	14800	12800	12640
X•, Y•	23500	21000	19000	18000	15500	13500	24800	22800	16500
V•	13500	11000	9000	8000	6500	5500	14800	12800	12640
ROO•	20000	17000	14000	17000	14500	12000	23800	21300	18600
RO•	7600	5800	4600	5800	4600	3600	6700	5500	12640

Les énergies d'activation sont exprimées en cal.mol^{-1} .

Corrections dues à l'environnement :

Si le carbone donneur d'un atome d'hydrogène est lié à un atome d'oxygène :

Incrément sur l'énergie d'activation de $-2000 \text{ cal.mol}^{-1}$

Si le carbone radicalaire accepteur d'un atome d'hydrogène est lié à un atome d'oxygène :

Incrément sur l'énergie d'activation de $+6000 \text{ cal.mol}^{-1}$

Tableau A-I-9 : Energies de tension de cycle de l'état de transition dans les isomérisations des radicaux alkyles et peroxy (E_{cycle})

Taille du cycle		4	5	6	7	8	9
Cycle saturé	0 ou 1 atome d'oxygène	26000	6300	1000	6400	9900	12800
	2 atome d'oxygène	23000	15500	8500	5000	4000	
Cycle insaturé	0 ou 1 atome d'oxygène	29800	5900	1400	5400		
	2 atome d'oxygène	26600	15100	9900	4000		

Les énergies de tension de cycle sont exprimées en cal.mol^{-1} .

Cas particulier du radical allyle Weissman et Benson (1989)

Isomérisation du radical 2-propényle ($t\text{-}\bullet\text{C}_3\text{H}_5$) en radical allyle ($a\text{-}\bullet\text{C}_3\text{H}_5$) :

$$k = 2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{47000}{RT}\right) \text{s}^{-1}$$

Isomérisation du radical 1-propényle ($s\text{-}\bullet\text{C}_3\text{H}_5$) en radical allyle ($a\text{-}\bullet\text{C}_3\text{H}_5$) :

$$k = 5,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{37000}{RT}\right) \text{s}^{-1}$$

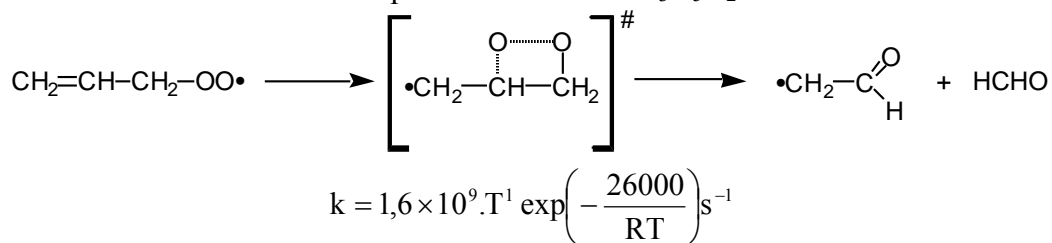
Tableau A-I-10 : Paramètres cinétiques des isomérisations des radicaux vinyliques en radicaux allyliques

Taille du cycle	H allylique primaire			H allylique secondaire			H allylique tertiaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
Cycle à 3 atomes	$6,67 \times 10^{12}$	0	47000	$6,67 \times 10^{12}$	0	44500	$6,67 \times 10^{12}$	0	42500
Cycle à 4 atomes	$1,67 \times 10^{13}$	0	37000	$1,67 \times 10^{13}$	0	34500	$1,67 \times 10^{13}$	0	32500

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$ (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

Isomérisation / décomposition des radicaux peroxyallyliques (Stoithard et Walker, 1992)

Ex : Réaction d'isomérisation / décomposition du radical $\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_2\cdot$:



DECOMPOSITIONS PAR BETA-SCISSION**Tableau A-I-11 : Constantes de vitesse des réactions de bêta-scission des liaisons Csp³-Csp³**

Produits	k _{bêta-scission}	méthode de calcul	réaction de référence	$\Delta_r H^\circ_{\text{réaction}}$	k _{addition}	Référence
Radical alkyle ou alkényle						
•CH ₃ + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{31000}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
•R _p + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{28700}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
•R _s + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{27700}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
•R _t + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{26700}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
•Y + alcène	$3,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{22500}{RT}\right)$	littérature				<i>Gierczak et al., 1986</i>
Radical alcoyle						
•R + cétone ou aldéhyde	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{15000}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
Radical allylique						
•CH ₃ + 1,3-diène	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{38200}{RT}\right)$	littérature	CH ₂ =CH-CH(•)-C ₂ H ₅ ⇌ CH ₂ =CH-CH=CH ₂ +•CH ₃			<i>Perrin et al., 1988</i>
•R _p + 1,3-diène	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{35900}{RT}\right)$	corrélation				<i>Perrin et al., 1988</i>
•R _s + 1,3-diène	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{34900}{RT}\right)$	corrélation				<i>Perrin et al., 1988</i>
•R _t + 1,3-diène	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{33900}{RT}\right)$	corrélation				<i>Perrin et al., 1988</i>
Radical vinylique						
•CH ₃ + diène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{32500}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	CH ₃ -CH=CH ₂ +•CH ₃ ⇌ CH ₃ -CH(•)-CH ₂ -CH ₃	-21900	$1,7 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{7400}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
•R _p + diène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{31000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	CH ₃ -CH=CH ₂ +•C ₂ H ₅ ⇌ CH ₃ -CH(•)-CH ₂ -C ₂ H ₅	-19490	$1,0 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{7250}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
•R _s + diène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{30000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	CH ₃ -CH=CH ₂ +•iC ₃ H ₇ ⇌ CH ₃ -CH(•)-CH ₂ -iC ₃ H ₇	-18970	$1,3 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{6220}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
•R _t + diène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{29000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	CH ₃ -CH=CH ₂ +•tC ₄ H ₉ ⇌ CH ₃ -CH(•)-CH ₂ -tC ₄ H ₉	-15070	$3,1 \times 10^9 \exp\left(-\frac{5890}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm³, mol, s, cal. Les enthalpies de réaction ont été calculées à 1000 K.

Tableau A-I-12 : Constantes de vitesse des réactions de bêta-scission des liaisons Csp³-Csp²

Produits	k _{bêta-scission}	méthode de calcul	réaction de référence	Δ _r H ^o _{réaction}	k _{addition}	référence
Radical alkényle						
•V _s + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{35500}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	•CH=CH ₂ + CH ₂ =CH ₂ ⇌ •CH ₂ -CH ₂ -CH=CH	-33880	$2,0 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{2000}{RT}\right)$	Weissman et al., 1984
•V _t + alcène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{34500}{RT}\right)$	corrélation				Weissman et al., 1984
Radical allylique						
•R + diène	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{50000}{RT}\right)$	littérature	CH ₂ =C(/CH ₂ •)-CH ₃ ⇌ •CH ₃ +CH ₂ =C=CH ₂			Tsang, 1973
Radical vinylique						
•CH ₃ + alcyne	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{31500}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	•CH ₃ +CH≡CH ⇌ •CH=CH-CH ₃	-26410	$6,0 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{7750}{RT}\right)$	Baulch et al., 1992
•R _p + alcyne	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{33000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	•C ₂ H ₅ +CH≡CH ⇌ •CH=CH-C ₂ H ₅	-24930	$5,0 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{7000}{RT}\right)$	Kerr et al., 1972
•R _s + alcyne	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{31000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	•iC ₃ H ₇ +CH≡CH ⇌ •CH=CH-iC ₃ H ₇	-24010	$5,0 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{6900}{RT}\right)$	Kerr et al., 1972
•R _t + alcyne	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{30000}{RT}\right)$	corrélation				Kerr et al., 1972

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm³, mol, s, cal. Les enthalpies de réaction ont été calculées à 1000 K.

Tableau A-I-13 : Constantes de vitesse des réactions de bêta-scission entre un carbone et un hydrogène alkylique

Produits	$k_{\text{bêta-scission}}$	méthode de calcul	réaction de référence	$\Delta_r H^\circ_{\text{réaction}}$	k_{addition}	référence
Radical alkyle, alkényle ou cycloalkyle						
$\bullet H_p$ + alcène ou diène	$1,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{39000}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
$\bullet H_s$ + alcène ou diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{38000}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
$\bullet H_t$ + alcène ou diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{37500}{RT}\right)$	littérature				<i>Glaude, 1999</i>
Radical allylique						
$\bullet H_p$ + diène	$1,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{51500}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=CH-CH_3 \rightleftharpoons CH_3-CH(\bullet)-CH_3$	-36180	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{1560}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
$\bullet H_s$ + diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{50500}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=CH-CH_3 \rightleftharpoons \bullet CH_2-CH_2-CH_3$	-33970	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{3260}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
$\bullet H_t$ + diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{46000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=C=CH_2 \rightleftharpoons \bullet CH_2-CH=CH_2$	-62060	$1,2 \times 10^{11} T^{0,69} \exp\left(-\frac{3000}{RT}\right)$	<i>Tsang, et al., 1992</i>

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm^3 , mol, s, cal. Les enthalpies de réaction ont été calculées à 1000 K.

Tableau A-I-14 : Constantes de vitesse des réactions de bêta-scission entre un carbone et un hydrogène allylique

Produits	$k_{\text{bêta-scission}}$	méthode de calcul	réaction de référence	$\Delta_r H^\circ_{\text{réaction}}$	k_{addition}	référence
Radical alkényle						
$\bullet H_s$ + diène	$1,6 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{34800}{RT}\right)$	littérature	$CH_2=CH-CH_2-CH_2\bullet \rightleftharpoons \bullet H + CH_2=CH-CH=CH_2$			<i>Weissman et al., 1984</i>
$\bullet H_t$ + diène	$1,6 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{34300}{RT}\right)$	corrélation				<i>Weissman et al., 1984</i>
Radical vinylique						
$\bullet H_p$ + diène	$1,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{40000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=CH-CH_3 \rightleftharpoons CH_3-CH(\bullet)-CH_3$	-36180	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{1560}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
$\bullet H_s$ + diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{38000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=CH-CH_3 \rightleftharpoons \bullet CH_2-CH_2-CH_3$	-33970	$1,3 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{3260}{RT}\right)$	<i>Tsang, 1991</i>
$\bullet H_t$ + diène	$1,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{35000}{RT}\right)$	estimation / réaction inverse	$\bullet H + CH_2=C=CH_2 \rightleftharpoons \bullet CH_2-CH=CH_2$	-62060	$1,2 \times 10^{11} T^{0,69} \exp\left(-\frac{3000}{RT}\right)$	<i>Tsang, et al., 1992</i>

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm^3 , mol, s, cal. Les enthalpies de réaction ont été calculées à 1000 K.

Tableau A-I-15 : Constantes de vitesse des réactions de bêta-scission entre un atome de carbone et un atome d'hydrogène vinylique

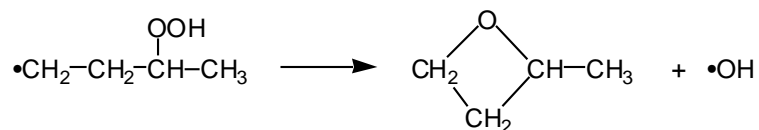
Produits	$k_{\text{bêta-scission}}$	méthode de calcul	réaction de référence	référence
Radical allylique				
$\bullet\text{H}_t$ + diène	$1,4 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{60000}{RT}\right)$	littérature	$\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2\bullet \leftrightarrow \bullet\text{H}+\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}_2$	<i>Tsang, et al., 1992</i>
Radical vinylique				
$\bullet\text{H}_s$ + alcyne	$4,0 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{38000}{RT}\right)$	corrélation		<i>Dean, 1985</i>
$\bullet\text{H}_t$ + alcyne	$4,0 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{36500}{RT}\right)$	littérature	$\bullet\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_3 \leftrightarrow \bullet\text{H}+\text{CH}\equiv\text{C}-\text{CH}_3$	<i>Dean, 1985</i>

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm^3 , mol, s, cal, par atome d'hydrogène.

Tableau A-I-16 : Paramètres cinétiques des bêta-scissions des liaisons C—O, O—O et O—H

Produits	$k_{\text{bêta-scission}}$	méthode de calcul	référence
Rupture C—O d'un radical hydroperoxyalkyle ou hydroperoxyalkényle			
aldéhyde ou cétone + radical alkyle	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{24000}{RT}\right)$	littérature	<i>Glaude, 1999</i>
alcène + radical alcoyle	$2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{26000}{RT}\right)$	littérature	<i>Glaude, 1999</i>
alcène ou diène + $\text{HO}_2\bullet$	$8,5 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{26000}{RT}\right)$	littérature	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture C—O d'un radical hydroperoxyallylique			
diène + $\text{HO}_2\bullet$	$7,9 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{33200}{RT}\right)$	corrélation	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture C—O d'un radical hydroperoxyvinylique			
diène ou alcyne + $\text{HO}_2\bullet$	$7,9 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{28000}{RT}\right)$	corrélation	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture O—O d'un radical hydroperoxyalkyle			
aldéhyde ou cétone + $\bullet\text{OH}$	$1,0 \times 10^9 \exp\left(-\frac{7500}{RT}\right)$	littérature	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture O—O d'un radical hydroperoxyallylique			
aldéhyde ou cétone insaturée + $\bullet\text{OH}$	$1,0 \times 10^9 \exp\left(-\frac{14700}{RT}\right)$	corrélation	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture O—O d'un radical hydroperoxyvinylique			
cétone insaturée + $\bullet\text{OH}$	$1,0 \times 10^9 \exp\left(-\frac{9500}{RT}\right)$	corrélation	<i>Glaude, 1999</i>
Rupture de la liaison O—H d'un radical hydroxyalkyle			
aldéhyde ou cétone + $\bullet\text{H}$	$2,5 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{29000}{RT}\right)$	littérature	<i>Wilk et al., 1989</i>

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$, en cm^3 , mol, s, cal.

DECOMPOSITIONS DE RADICAUX EN ETHERS CYCLIQUES**Tableau A-I-17 : Données cinétiques de décomposition des radicaux $\bullet\text{QOOH}$ en éthers cycliques**

Nature des éthers cycliques formés	Nombre d'atomes dans le cycle	A en s^{-1}	E en cal.mol^{-1}
Ethers cycliques saturés (Bounaceur et al., 2002)	3	$3,0 \times 10^{11}$	16500
	4	$2,5 \times 10^{10}$	15250
	5	$2,1 \times 10^9$	6500
	6	$1,5 \times 10^8$	1800
Ethers cycliques insaturés ou à double liaison conjuguée	4	$1,4 \times 10^{11}$	18850
	5	$1,2 \times 10^{10}$	6100
	6	$8,6 \times 10^8$	3200
Ethers cycliques saturés avec chaîne latérale insaturée	4	$2,5 \times 10^{10}$	18850
	5	$2,1 \times 10^9$	6100
	6	$1,5 \times 10^8$	3200

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$. (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

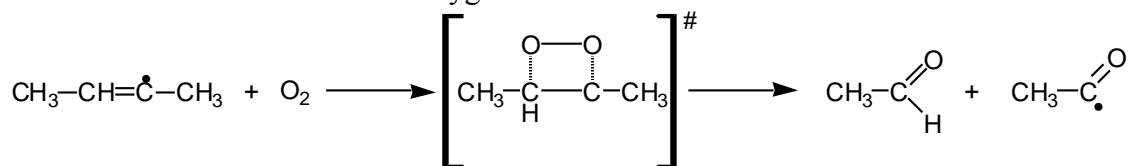
OXYDATIONS**Tableau A-I-18 : Paramètres cinétiques des réactions d'oxydation conduisant à la formation d'un radical HO₂• et d'une molécule**

Radical initial	Hydrogène arraché	H primaire			H secondaire			H tertiaire		
		A	b	E	A	b	E	A	b	E
alkyle	alkylique	2,3×10 ¹¹	0	5000	7,9×10 ¹¹	0	5000	4,5×10 ¹¹	0	5000
alkényle	alkylique	2,3×10 ¹¹	0	5000	7,9×10 ¹¹	0	5000	4,5×10 ¹¹	0	5000
	allylique				1,3×10 ¹¹	0	2500	7,5×10 ¹⁰	0	2500
allylique	alkylique	2,3×10 ¹¹	0	15200	7,9×10 ¹¹	0	15200	4,5×10 ¹¹	0	15200
	vinylique							1,0×10 ¹²	0	22730

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal, K, par atome d'hydrogène susceptible de réagir.

Cas des radicaux vinyliques

Contrairement aux oxydations des radicaux alkyles, allyliques ou cyclaniques, les oxydations des radicaux vinyliques conduisent à la formation d'espèces oxygénées (Pilling, 1997). Les oxydations des radicaux vinyliques passent par la formation d'un intermédiaire cyclique issu de l'addition concertée de la molécule d'oxygène sur la double liaison :



Les paramètres cinétiques de ces réactions sont ceux de l'oxydation du radical vinyle en formaldéhyde et •CHO. L'expression de la constante de vitesse est la suivante :

$$k = 4,6 \times 10^{16} \cdot T^{-1,39} \cdot \exp\left(-\frac{1010}{RT}\right) \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad \text{Mebel et al. (1996)}$$

METATHÈSES**Tableau A-I-19 : Paramètres cinétiques des métathèses des atomes d'hydrogène alkyliques et alkényles**

	H primaire			H secondaire			H tertiaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
•O•	$1,7 \times 10^{13}$	0	7850	$1,3 \times 10^{13}$	0	5200	$1,0 \times 10^{13}$	0	3280
•H	$9,5 \times 10^6$	2	7700	$4,5 \times 10^6$	2	5000	$4,2 \times 10^6$	2	2400
•OH	$8,9 \times 10^5$	2	450	$1,3 \times 10^6$	2	-770	$1,1 \times 10^6$	2	-1870
•CH ₃	$1,0 \times 10^{-1}$	4	8200	$1,0 \times 10^{11}$	0	9600	$1,0 \times 10^{11}$	0	7900
HO ₂ •	$2,0 \times 10^{11}$	0	17000	$2,0 \times 10^{11}$	0	15500	$1,0 \times 10^{12}$	0	14000
•CHO	$3,4 \times 10^4$	2,5	18500	$5,4 \times 10^6$	1,9	17000	$3,4 \times 10^4$	2,5	13500
•CH ₂ OH	$3,3 \times 10^1$	2,95	14000	$3,0 \times 10^1$	2,95	12000	$1,2 \times 10^2$	2,73	10800
•OCH ₃	$5,4 \times 10^{10}$	0	7300	$7,2 \times 10^{10}$	0	4500	$2,3 \times 10^{10}$	0	2900
•OOR	$2,0 \times 10^{12}$	0	20000	$1,5 \times 10^{12}$	0	17500	$1,5 \times 10^{12}$	0	15000
•C ₂ H ₅	$1,0 \times 10^{11}$	0	13500	$1,0 \times 10^{11}$	0	11000	$1,0 \times 10^{11}$	0	9200
<i>i</i> -C ₃ H ₇ •	$1,4 \times 10^{-3}$	4,2	8700	$1,4 \times 10^{-3}$	4,2	8000	$1,4 \times 10^{-3}$	4,2	6000
•R _p	$1,0 \times 10^{11}$	0	13500	$1,0 \times 10^{11}$	0	11200	$1,0 \times 10^{11}$	0	9000
•R _s	$1,0 \times 10^{11}$	0	14500	$1,0 \times 10^{11}$	0	12200	$1,0 \times 10^{11}$	0	10000
•R _t	$1,0 \times 10^{11}$	0	15000	$1,0 \times 10^{11}$	0	12700	$1,0 \times 10^{11}$	0	10500
•Y	$4,0 \times 10^1$	3,3	19840	$4,0 \times 10^1$	3,3	18170	$4,0 \times 10^1$	3,3	17170

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$. (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

Tableau A-I-20 : Paramètres cinétiques des métathèses des atomes d'hydrogène vinyliques

	H secondaire			H tertiaire		
	A	b	E	A	b	E
•O•	$6,0 \times 10^{10}$	0,7	8960	$6,0 \times 10^{10}$	0,7	7630
•H	$4,1 \times 10^5$	2,5	12280	$4,1 \times 10^5$	2,5	9790
•OH	$1,1 \times 10^6$	2,0	2780	$1,1 \times 10^6$	2,0	1450
•CH ₃	$6,8 \times 10^{-1}$	3,5	12900	$9,8 \times 10^{-1}$	3,5	11700

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$. (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

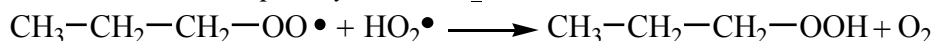
Tableau A-I-21 : Paramètres cinétiques des métathèses des atomes d'hydrogène allyliques

	H primaire			H secondaire			H tertiaire		
	A	b	E	A	b	E	A	b	E
•O•	$5,8 \times 10^{10}$	0,7	5900	$4,4 \times 10^{10}$	0,7	3250	$3,4 \times 10^{10}$	0,7	1330
•H	$5,8 \times 10^4$	2,5	2510	$2,7 \times 10^4$	2,5	-1900	$2,5 \times 10^4$	2,5	-2790
•OH	$1,0 \times 10^6$	2,0	-298	$1,5 \times 10^6$	2,0	-1520	$1,3 \times 10^6$	2,0	-2620
•CH ₃	0,74	3,5	5670	$5,0 \times 10^{10}$	0	7300	$5,0 \times 10^{10}$	0	5600
HO ₂ •	$3,2 \times 10^3$	2,6	13900	$3,2 \times 10^3$	2,6	12400	$1,6 \times 10^4$	2,6	10900
•CHO	$3,6 \times 10^6$	1,9	17000	$5,7 \times 10^8$	1,3	15500	$3,6 \times 10^6$	1,9	12000
•CH ₂ OH	$2,0 \times 10^1$	2,95	12000	$1,8 \times 10^1$	2,95	10000	2,4	2,95	8800
•OCH ₃	$6,6 \times 10^{11}$	0	4000	$8,9 \times 10^{11}$	0	1200	$2,8 \times 10^{11}$	0	-400
•OOR	$6,6 \times 10^{11}$	0	17050	$5,0 \times 10^{11}$	0	14550	$5,0 \times 10^{11}$	0	12050
•C ₂ H ₅	0,74	3,5	6640	2,2	3,5	4140	2,2	3,5	2340
•iC ₃ H ₇	$2,2 \times 10^{-2}$	4	8060	$2,2 \times 10^{-2}$	4	7360	$2,2 \times 10^{-2}$	4	5360

Les constantes de vitesse sont de la forme $k = A T^b \exp(-E/RT)$. (Unités : cm^3 , mol, s, cal).

DISMUTATIONS

Dismutations entre les radicaux peroxydes et HO₂•



Les paramètres cinétiques utilisés sont :

$$k = 2,0 \times 10^{11} \cdot \exp\left(+\frac{1300}{RT}\right) \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad \text{Glaude (1999)}$$

Dismutations entre les radicaux allyles et HO₂•



Les paramètres cinétiques utilisés sont :

$$k = 2,5 \times 10^{10} T^1 \exp\left(-\frac{3460}{RT}\right) \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad \text{Heyberger (2002)}.$$

COMBINAISONS

L'énergie d'activation est nulle et le facteur préexponentiel est calculé par le logiciel KINGAS à partir de la théorie des collisions modifiée.

Cas particulier des radicaux allyliques

L'expression de la constante de vitesse a été modifiée par *B. Heyberger* (2002) de manière à rendre compte de la dépendance en température de cette réaction de terminaison :

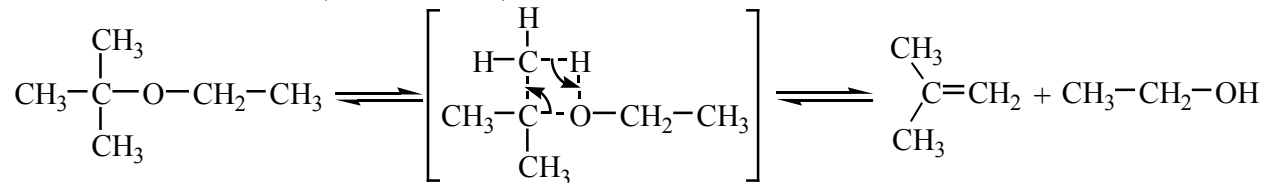
$$k = 10^{15} \times T^{-0,8} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

Cas particulier des terminaisons avec les atomes d'hydrogène

L'expression de la constante de vitesse pour les terminaisons avec les radicaux $H \cdot$ a été modifiée. La nouvelle valeur est celle conseillée par *Allara et Shaw* (1980) : $k = 1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$

REACTIONS MOLECULAIRESRéactions de décomposition moléculaire des éthers

Par exemple la réaction de décomposition moléculaire de l'ETBE conduit à la formation d'éthanol et d'isobutène (*Benson*, 1976) :

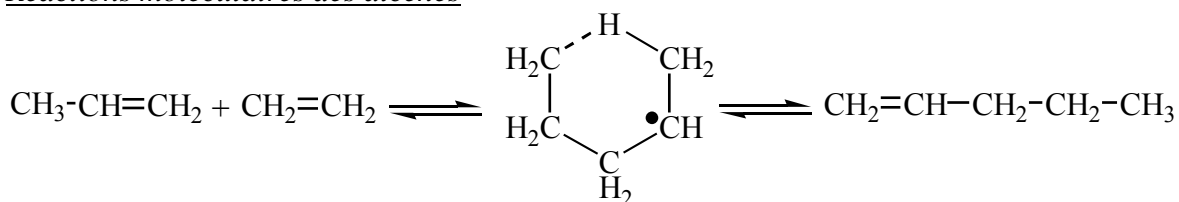


La constante de vitesse de décomposition du MTBE :

$$k_{\text{Glaude}}^{\text{MTBE}} = 2,8 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{59000}{RT}\right) \text{ s}^{-1} \quad \text{Glaude (1999)}$$

La constante de vitesse de décomposition de l'ETBE :

$$k_{\text{El Kadi}}^{\text{ETBE}} = 1,0 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{52000}{RT}\right) \text{ s}^{-1} \quad \text{El Kadi et al. (1995)}$$

Réactions moléculaires des alcènes**Tableau A-I-22 : Paramètres cinétiques des réactions moléculaires des alcènes ènes**

Réactions	A	n	E
<i>Réactions ène</i>			
C ₂ H ₄ + alcène	3,2×10 ³	2,2	34100
CH ₂ =C(R ₁)(R ₂) + alcène	1,3×10 ²	2,5	36700
C(R ₁)(R ₂)=C(R ₃)(R ₄) + alcène	1,7×10 ³	2,1	36000
<i>Réaction rétro-ène</i>			
alcène1→alcène2+alcène3	4,0×10 ¹²	0	57500

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal, K. R₁, R₂, R₃ et R₄ sont des groupements alkyles.

VALEURS CINÉTIQUES ET RÈGLES GÉNÉRIQUES DE DÉCOMPOSITION DES ESPÈCES PRIMAIRES DANS LE MÉCANISME SECONDAIRE

REACTIONS DE BRANCHEMENT DÉGÉNÈRE

Pour toutes ces réactions, la constante de vitesse de la décomposition est celle de la cassure unimoléculaire de la liaison O–OH, soit, en utilisant les méthodes de Benson (*Benson*, 1976) :

$$k = 1,5 \times 10^{16} \exp\left(-\frac{43000}{RT}\right) \text{s}^{-1} \quad \text{Sahetchian et al. (1992)}$$

Cas particulier des peroxydes branchés

Pour les peroxydes issus de la combustion d'espèces fortement branchés comme l'iso-octane, la constante cinétique est la suivante :

$$k = 3,0 \times 10^{15} \exp\left(-\frac{43000}{RT}\right) \text{s}^{-1} \quad \text{Buda et al. (2005)}$$

LES REGLES GENERIQUES DE DECOMPOSITION DES AGENTS DE BRANCHEMENT DEGENERES

Les coefficients x, y et z sont calculés de manière à équilibrer la réaction considérée.

Tableau A-I-23 : Règles génériques de décomposition des agents de branchement ne contenant pas de double liaison entre deux atomes de carbone

Molécule	Formule	Produits	
R(OOH)	$C_nH_{2n+1}(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet C_2H_5 + x C_2H_4 + CH_3CHO$
		n impair	$\bullet OH + \bullet C_2H_5 + x C_2H_4 + HCHO$
R(OOH) ₂	$C_nH_{2n}(O_4H_2)$	n pair	$2 \bullet OH + 2 HCHO + x C_2H_4$
			$2 \bullet OH + 2 CH_3CHO + y C_2H_4$
			$\bullet OH + HO_2\bullet + z C_2H_4 + CH_3CHO$
		n impair	$2 \bullet OH + HCHO + x C_2H_4 + CH_3CHO$
			$2 \bullet OH + CH_3CHO + y C_2H_4 + HCHO$
			$\bullet OH + HO_2\bullet + z C_2H_4 + HCHO$
R(CO)(OOH)	$C_nH_{2n+1}(CO)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CH_3 + HCHO + CO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet C_2H_5 + HCHO + CO + x C_2H_4$
R(CHO)(OOH)	$C_nH_{2n}(CHO)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CHO + CH_3CHO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CH_2CHO + CH_3CHO + x C_2H_4$
R(O@)(OOH)	$C_nH_{2n-1}(O@)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CHO + HCHO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CH_2CHO + HCHO + x C_2H_4$
R(OH)(OOH)	$C_nH_{2n}(OH)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CH_2OH + x C_2H_4 + HCHO$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CH_2OH + x C_2H_4 + CH_3CHO$
R(CO)(OH)(OOH)	$C_nH_{2n}(CO)(OH)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CH_2OH + HCHO + CO + x C_2H_4$
		n impair	$2 \bullet OH + HCHO + CO + x C_2H_4$

Tableau A-I-24 : Règles génériques de décomposition des agents de branchement contenant une double liaison entre deux atomes de carbone

Molécule	Formule	Produits	
R(OOH)Z	$C_nH_{2n-1}(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet H + x C_2H_4 + C_3H_5CHO$
		n impair	$\bullet OH + \bullet H + x C_2H_4 + C_2H_3CHO$
R(OOH)Y	$C_nH_{2n-1}(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet C_2H_5 + CH_2CO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CH_3 + CH_2CO + x C_2H_4$
R(OOH) ₂ Z	$C_nH_{2n-2}(O_4H_2)$	n pair	$2 \bullet OH + 2 HCHO + x C_2H_4 + C_2H_2$
			$2 \bullet OH + CH_2CO + y C_2H_4 + CH_3CHO$
			$\bullet OH + HO_2\bullet + z C_2H_4 + CH_2CO$
		n impair	$2 \bullet OH + HCHO + x C_2H_4 + C_2H_2 + CH_3CHO$
			$2 \bullet OH + CH_2CO + y C_2H_4 + HCHO$
			$\bullet OH + HO_2\bullet + z C_2H_4 + HCHO + C_2H_2$
R(CO)(OOH)Z	$C_nH_{2n-1}(CO)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CH_2CHO + CO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CHO + CO + x C_2H_4$
R(CHO)(OOH)Z	$C_nH_{2n-2}(CHO)(O_2H)$	n pair	$\bullet OH + \bullet CHO + CH_2CO + x C_2H_4$
		n impair	$\bullet OH + \bullet CH_2CHO + CH_2CO + x C_2H_4$

REGLES DE CONSOMMATION DES ALCANES ET DES ALCENES (GLAUDE, 1999).**Tableau A-I-25 : Règles génériques de consommation des alcanes et des alcènes par métathèse**

Réaction	Produits		Constante de vitesse
RH + •R'	n pair	•C ₂ H ₅ + R'H + x C ₂ H ₄	6 atomes d'hydrogène alkyliques secondaires (Tableau A-I-19)
	n impair	•CH ₃ + R'H + x C ₂ H ₄	
ZH + •R'	n pair	•C ₂ H ₅ +RH+1,3-C ₄ H ₆ +x C ₂ H ₄	2 atomes d'hydrogène allyliques secondaires (Tableau A-I-21)
	n impair	•CH ₃ +RH+1,3-C ₄ H ₆ +x C ₂ H ₄	
YH + •R'	R'H + •Y		3 atomes d'hydrogène allyliques primaires
•Y + ZH	n+m pair	x C ₂ H ₄ +•C ₂ H ₃	$k = 6,0 \times 10^9 \exp\left(-\frac{11400}{RT}\right)$
	n+m impair	x C ₂ H ₄ +C ₂ H ₂ +•CH ₃	
•Y + •R''	R''Y		k = 10 ¹³ si •R'' = •H, •OH, •CH ₃ , •C ₂ H ₅ , •CHO, •CH ₂ OH, •C _n H _{2n-1}
			k = 5×10 ¹² si •R'' = HO ₂ •

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal, K.

RH est de la forme C_nH_{2n+2}

ZH est de la forme C_nH_{2n}

•Y est de la forme C_mH_{2m-1}

•R' est •H, •O•, •OH, HO₂•, •CH₃, ou •C₂H₅ et R'H est H₂, •OH, H₂O, H₂O₂, CH₄ ou C₂H₆.

Tableau A-I-26 : Règles génériques de consommation des alcènes par addition d'un radical sur la double liaison

Radical	Produits		Constante de vitesse
•H	n pair	•C ₂ H ₅ + x C ₂ H ₄	$k = 7,2 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{2900}{RT}\right)$
	n impair	•CH ₃ + x C ₂ H ₄	
	n pair	•CH ₃ + C ₃ H ₆ + x C ₂ H ₄	$k = 7,2 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{1200}{RT}\right)$
	n impair	•C ₂ H ₅ + C ₃ H ₆ + x C ₂ H ₄	
•CH ₃	n pair	•CH ₃ + C ₄ H ₈ + x C ₂ H ₄	$k = 1,7 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{7400}{RT}\right)$
	n impair	•C ₂ H ₅ + C ₄ H ₈ + x C ₂ H ₄	
	n pair	•C ₂ H ₅ + C ₃ H ₆ + x C ₂ H ₄	$k = 9,6 \times 10^{10} \exp\left(-\frac{8000}{RT}\right)$
	n impair	•CH ₃ + C ₃ H ₆ + x C ₂ H ₄	
•OH	•CH ₃ + R(CHO) R(CHO) est de la forme C _(n-2) H _{2(n-2)} CHO		$k = 1,4 \times 10^{12} \exp\left(\frac{900}{RT}\right)$
	n pair	•CH ₃ + HCHO + x C ₂ H ₄	$k = 1,4 \times 10^{12} \exp\left(\frac{900}{RT}\right)$
	n impair	•C ₂ H ₅ + HCHO + x C ₂ H ₄	
•O•	n pair	•C ₂ H ₅ + •H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	$k = 3,4 \times 10^7 \cdot T^{1,83} \exp\left(\frac{550}{RT}\right)$
	n impair	•CH ₃ + •H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	
HO ₂ •	•OH + R(O@3) R(O@3) est de la forme C _n H _{2n} O		$k = 1,0 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{14400}{RT}\right)$

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal, K.

REGLE DE CONSOMMATION DE CES ETHERS (GLAUDE, 1999).**Tableau A-I-27 : Règles génériques de consommation des éthers cycliques de formule brute $C_nH_{2n}O$**

Réaction	Formule	Produits		Constante de vitesse
$R(O@3) + \bullet R'$	$C_nH_{2n}O$	n pair	$\bullet C_2H_5 + R'H + CH_2CO + x C_2H_4$	6 H alkyls secondaires
		n impair	$\bullet CH_3 + R'H + CH_2CO + x C_2H_4$	
$R(O@n) + \bullet R'$	$C_nH_{2n}O$	$n > 3$	$\bullet R(O@n) + R'H$	6 H alkyls secondaires
$\bullet R(O@n)$	$C_nH_{2n-1}O$	n pair	$\bullet CH_2CO + x C_2H_4$	$k = 5,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{24800}{RT}\right)$
		n impair	$\bullet CHO + x C_2H_4$	
$\bullet R(O@n) + O_2$	$C_nH_{2n-1}O$	$R(O@n)OO\bullet$		$k = 2,2 \times 10^{19} \cdot T^{-2,5}$
$R(O@n)OO\bullet$	$C_nH_{2n-1}O_3$	$\bullet R(O@n) + O_2$		$k = 5,0 \times 10^{22} \cdot T^{-2,5} \exp\left(-\frac{36000}{RT}\right)$
$R(O@n)OO\bullet$	$C_nH_{2n-1}O_3$	$\bullet R(O@n)OOH$		$k = 8,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{25500}{RT}\right)$
$\bullet R(O@n)OOH + O_2$	$C_nH_{2n-1}O_3$	$R(O@n)(OOH)OO\bullet$		$k = 2,2 \times 10^{19} \cdot T^{-2,5}$
$R(O@n)(OOH)OO\bullet$	$C_nH_{2n-1}O_5$	$\bullet R(O@n)OOH + O_2$		$k = 5,0 \times 10^{22} \cdot T^{-2,5} \exp\left(-\frac{36000}{RT}\right)$
$R(O@n)(OOH)OO\bullet$	$C_nH_{2n-1}O_5$	$\bullet OH + R(O@n)(CO)(OOH)$		$k = 1,0 \times 10^9 \exp\left(-\frac{7500}{RT}\right)$
$R(O@n)(CO)(OOH)$	$C_nH_{2n-2}O_4$	n pair	$\bullet CHO + \bullet OH + CO_2 + x C_2H_4$	$k = 1,5 \times 10^{16} \exp\left(-\frac{43000}{RT}\right)$
		n impair	$\bullet CH_2CHO + \bullet OH + CO_2 + x C_2H_4$	

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm^3 , mol, s, cal, K.

$\bullet R'$ est $\bullet H$, $\bullet O$, $\bullet OH$, $HO_2\bullet$, $\bullet CH_3$, ou $\bullet C_2H_5$. $R'H$ est H_2 , $\bullet OH$, H_2O , H_2O_2 , CH_4 ou C_2H_6 .

Tableau A-I-28 : Règles génériques de consommation des éthers cycliques insaturés ou avec une fonction hydroxyle

Réaction	Formule	Produits		Constante de vitesse
R(O@n)Z + •R'	C _n H _{2n-2} O	n pair	•C ₂ H ₃ + R'H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	4 H allyliques secondaires
		n impair	•C ₃ H ₅ + R'H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	
R(OH)(O@3) + •R'	C _n H _{2n-1} (OH)O	n pair	•C ₂ H ₄ OH + R'H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	6 H alkyliques secondaires
		n impair	•CH ₃ OH + R'H + CH ₂ CO + x C ₂ H ₄	
R(OH)(O@n) + •R'	C _n H _{2n-1} (OH)O	•R(OH)(O@n)		6 H alkyliques secondaires
•R(OH)(O@n)	C _n H _{2n-2} (OH)O	n pair	•CH ₂ CO + CH ₃ CHO + x C ₂ H ₄	k = 5,0 × 10 ¹³ exp(-24800/RT)
		n impair	•CHO + CH ₃ CHO + x C ₂ H ₄	
•R(OH)(O@n) + O ₂	C _n H _{2n-2} (OH)O	R(OH)(O@n)OO•		k = 2,2 × 10 ¹⁹ .T ^{-2,5}
R(OH)(O@n)OO•	C _n H _{2n-2} (OH)O ₃	•R(OH)(O@n) + O ₂		k = 5,0 × 10 ²² .T ^{-2,5} exp(-36000/RT)
R(OH)(O@n)OO•	C _n H _{2n-2} (OH)O ₃	•R(OH)(O@n)OOH		k = 8,0 × 10 ¹³ exp(-25500/RT)
•R(OH)(O@n)OOH + O ₂	C _n H _{2n-2} (OH)O ₃	R(OH)(O@n)(OOH)OO•		k = 2,2 × 10 ¹⁹ .T ^{-2,5}
R(OH)(O@n)(OOH)OO•	C _n H _{2n-2} (OH)O ₅	•R(OH)(O@n)OOH + O ₂		k = 5,0 × 10 ²² .T ^{-2,5} exp(-36000/RT)
R(OH)(O@n)(OOH)OO•	C _n H _{2n-2} (OH)O ₅	•OH + R(OH)(O@n)(CO)(OOH)		k = 1,0 × 10 ⁹ exp(-7500/RT)
R(OH)(O@n)(CO)(OOH)	C _n H _{2n-3} (OH)O ₄	n impair	•OH + •CHO + CO ₂ + x C ₂ H ₄ + HCHO	k = 1,5 × 10 ¹⁶ exp(-43000/RT)
		n pair	•OH + •CHO + CO ₂ + x C ₂ H ₄ + CH ₃ CHO	

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal, K.

•R' est •H, •O•, •OH, HO₂•, •CH₃, ou •C₂H₅. R'H est H₂, •OH, H₂O, H₂O₂, CH₄ ou C₂H₆.

REGLES GENERIQUES DE CONSOMMATION DES ALCOOLS SATURES ET INSATURES (GLAUDE, 1999).

Tableau A-I-29 : Règles génériques de consommation des alcools

Réaction	Formule	Produits		Métathèse considérée
R(OH) + •R'	C _n H _{2n+1} (OH)	•OH + R'H + ZH	ZH = C _n H _{2n}	2 H alkyliques secondaires
		•CH ₃ + R'H + R"CO	R"CO = C _{n-2} H _{2n-2} 2CO	1 H alkylique tertiaire
R(OH)Z + •R'	C _n H _{2n-1} (OH)	•OH + R'H + ZZH	ZZH = C _n H _{2n-2}	2 H allyliques secondaires
cycR(OH) + •R'	C _n H _{2n-1} (OH)	•OH + R'H + cycZH	cycZH = C _n H _{2n-2}	4 H alkyliques secondaires
		n pair	•CH ₃ CO + R'H + x C ₂ H ₄	1 H alkylique tertiaire
		n impair	•CH ₃ + CH ₂ CO + R'H + x C ₂ H ₄	

•R' est •H, •O•, •OH, HO₂•, •CH₃, ou •C₂H₅. R'H est H₂, •OH, H₂O, H₂O₂, CH₄ ou C₂H₆.

REACTIONS DE DECOMPOSITION DES ALDEHYDES**Tableau A-I-30 : Règles génériques de consommation des aldéhydes**

Réaction	Formule	Produits		Constante de vitesse
$R(\text{CHO}) + \bullet R'$	$C_n H_{2n+1} \text{CHO}$	$R'H + \bullet \text{RCO}$		métathèse des H aldéhydiques
$\bullet \text{RCO}$	$C_n H_{2n+1} \text{CO}$	n pair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CO} + x \text{C}_2\text{H}_4$	$k = 2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{17150}{RT}\right)$
		n impair	$\bullet \text{CH}_3 + \text{CO} + x \text{C}_2\text{H}_4$	
$\bullet \text{RCO} + \text{O}_2$		$\text{RCOO}_2\bullet$		$k = 2,2 \times 10^{19} T^{-2,5}$
$\text{RCOO}_2\bullet$		$\text{RCO} + \text{O}_2$		$k = 5,0 \times 10^{22} T^{-2,5} \exp\left(-\frac{32500}{RT}\right)$
$\text{RCOO}_2\bullet$	$C_n H_{2n+1} \text{COO}_2\bullet$	$\bullet \text{OH} + \text{CO}_2 + \text{ZH}$		$k = 4,5 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{25000}{RT}\right)$
$R(\text{CHO})Z$	$C_n H_{2n-1} \text{CHO}$	$R'H + \bullet R(\text{CO})Z$		métathèse des H aldéhydiques
$\bullet R(\text{CO})Z$	$C_n H_{2n-1} \text{CO}$	n pair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CO} + x \text{C}_2\text{H}_4$	$k = 2,0 \times 10^{13} \exp\left(-\frac{17150}{RT}\right)$
		n impair	$\bullet \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CO} + x \text{C}_2\text{H}_4$	
$\bullet R(\text{CO})Z + \text{O}_2$		$\text{RCOO}_2\bullet Z$		$k = 2,2 \times 10^{19} T^{-2,5}$
$\text{RCOO}_2\bullet Z$	$C_n H_{2n-1} \text{COO}_2\bullet$	$\bullet \text{OH} + \text{CO}_2 + \text{ZZH}$		$k = 4,5 \times 10^{11} \exp\left(-\frac{25000}{RT}\right)$

Les données cinétiques sont exprimées dans le système d'unités cm^3 , mol, s, cal, K.

$\bullet R'$ est $\bullet \text{H}$, $\bullet \text{O}$, $\bullet \text{OH}$, $\text{HO}_2\bullet$, $\bullet \text{CH}_3$, ou $\bullet \text{C}_2\text{H}_5$. $R'H$ est H_2 , $\bullet \text{OH}$, H_2O , H_2O_2 , CH_4 ou C_2H_6 .

ZH est de la forme $\text{C}_n \text{H}_{2n}$, et ZZH $\text{C}_n \text{H}_{2n-2}$.

REACTIONS DE DECOMPOSITION DES CETONES (GLAUDE, 1999)**Tableau A-I-31 : Règles génériques de consommation des cétones**

Réaction	Formule	Produits	
$R(\text{CO}) + \bullet R'$	$C_n H_{2n+2}(\text{CO})$	n pair	$\bullet \text{CH}_3 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
		n impair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
$R(\text{CO})Z + \bullet R'$	$C_n H_{2n}(\text{CO})$	n pair	$\bullet \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
		n impair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
$\text{cyc}R(\text{CO}) + \bullet R'$	$C_n H_{2n}(\text{CO})$	n pair	$\bullet \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
		n impair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_4$
$\text{cyc}R(\text{CO})Z + \bullet R'$	$C_n H_{2n-2}(\text{CO})$	n pair	$\bullet \text{C}_3\text{H}_5 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_2$
		n impair	$\bullet \text{C}_2\text{H}_3 + \text{CH}_2\text{CO} + R'H + x \text{C}_2\text{H}_2$

$\bullet R'$ est $\bullet \text{H}$, $\bullet \text{O}$, $\bullet \text{OH}$, $\text{HO}_2\bullet$, $\bullet \text{CH}_3$, ou $\bullet \text{C}_2\text{H}_5$. $R'H$ est H_2 , $\bullet \text{OH}$, H_2O , H_2O_2 , CH_4 ou C_2H_6 .

ANNEXE II

BASES ET MECANISMES

ANNEXE II-A

BASE DE REACTIONS C₀-C₂

Formée des processus dont les réactifs contiennent au plus deux atomes de carbone, cette base a été construite par Barbé et al. (1995) en utilisant une matrice des espèces prises en compte comme le proposent Tsang et al. (1986), afin d'écrire systématiquement toutes les réactions possibles lorsque les données étaient disponibles.

La base de réactions C₀-C₂ se compose 443 équations correspondant à 804 processus élémentaires qui mettent en œuvre comme réactifs 18 molécules et 20 radicaux libres. 14 molécules comportant 3 ou 4 atomes de carbone apparaissent comme produits mais ne sont pas consommées ici. Cette base est présentée dans le tableau ci-après. Les références bibliographiques auxquelles renvoient les noms en italique sont données à la suite du tableau. Les constantes de vitesse sous la forme $k = A.T^b \cdot \exp(-E_a/RT)$ sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal.

La base C₀-C₂ a été validée par comparaison avec des expériences faites dans des conditions expérimentales variées telles que l'oxydation du méthane et de l'éthane en réacteur agité continu entre 773 K et 1573 K (Barbé et al., 1995) et en tube à onde de choc (Baugé, 1997) ou la combustion du méthane et de l'acétylène en flamme prémélangée (Fournet et al., 1998).

La base de réactions C₀-C₂ est régulièrement actualisée à partir de données cinétiques publiées dans la littérature ou à l'aide de constantes de vitesses qui semblent plus judicieuses

Les coefficients d'efficacité ont été rajoutés afin de tenir compte des effets de pression.

BASE DE REACTIONS C₀-C₂

Réactions	A	b	E _a	n°	références
Réaction des espèces non oxygénées					
Réactions de H₂					
H+H+M↔H ₂ +M O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/H ₂ /0.0/C ₂ H ₆ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/	1.87E18	-1.0	0.0	(1,-1)	<i>Baulch 94</i>
Réactions de CH					
CH+H↔C+H ₂	7.8E13	0.	0.0	(2,-2)	<i>Peeters 97</i>
Réactions de :CH₂(T)(S)					
CH ₂ (S)+M↔CH ₂ +M N ₂ /0.4/O ₂ /.4/ CO/.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /.48/He/0.35/C ₂ H ₄ Z/1.6/Ar/0.24/	1.51E13	0.	0.	(3,-3)	<i>Baulch 94</i>
CH ₂ (S)+H↔CH+H ₂	3.0E13	0.	0.	(4,-4)	<i>Tsang 86</i>
Réactions de :CH₂(T)					
CH ₂ (T)+H↔CH+H ₂	6.0E12	0.	-1.8E3	(5,-5)	<i>Baulch 94</i>

CH2(T)+C \leftrightarrow C2H+H		5.0E13	0.	0.	(6,-6)	Ranzi 94
CH2(T)+CH2 \rightarrow C2H2+H+H		1.2E14	0.	0.8E3	(7)	Baulch 94
Réactions de •CH3						
CH3+M \leftrightarrow CH2(T)+H+M		2.91E16	0.	90.7E3	(8,-8)	Baulch 94
O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/C ₂ H ₆ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/						
CH3+H \leftrightarrow CH2(S)+H2		6.0E13	0.	15.0E3	(9,-9)	Baulch 94
CH3+CH \leftrightarrow C2H3+H		3.0E13	0.	0.	(10,-10)	Dagaut 91
CH3+CH2(S) \leftrightarrow C2H4+H		1.8E13	0.	0.	(11,-11)	Tsang 86
CH3+CH2 \leftrightarrow C2H4+H		4.2E13	0.	0.	(12,-12)	Baulch 94
CH3+C \leftrightarrow C2H2+H		5.0E13	0.	0.	(13,-13)	Ranzi 94
CH3+CH3(+M) \rightarrow C2H6(+M)	k _∞	3.6E13	0.	0.	(14)	Baulch 94
	k ₀	3.6E41	-7.0	2.76E3		
	coefficients de Troe:	0.62	73	1180		
C2H6(+M) \rightarrow CH3+CH3(+M)	k _∞	1.8E21	-1.24	90.9E3	(-14)	Baulch 94
	k ₀	1.89E49	-8.24	93.7E3		
	coefficients de Troe:	0.62	73	1180		
CH3+CH3 \leftrightarrow C2H5+H		3.0E13	0.	13.5E3	(15,-15)	Baulch 94
CH3+CH3 \leftrightarrow C2H4+H2		2.1E14	0.	19.3E3	(16,-16)	Frank 86 Nist
Réactions de CH4						
H+CH3(+M) \rightarrow CH4(+M)	k _∞	1.67E14	0.	0.0	(17)	Baulch 94
	k ₀	1.41E24	-1.8	0.0		
	coefficients de Troe	0.37		3315	61	
CH4(+M) \rightarrow CH3+H(+M)	k _∞	2.4E16	0.	105.0E3	(-17)	Baulch 94
	k ₀	1.3E18	0.	90.9E3		
	coefficients de Troe:	0.	1350	1	7830	
CH4(+CH4) \rightarrow CH3+H(+CH4)	k _∞	2.4E16	0.	105.0E3	(-17')	Baulch 94
	k ₀	8.43E17	0.	90.9E3		
	coefficients de Troe:	0.69	90	2210		
CH4+H \leftrightarrow CH3+H2		1.3E4	3.	8.0E3	(18,-18)	Baulch 94
CH4+CH \leftrightarrow C2H4+H		3.0E13	0.	-0.4E3	(19,-19)	Dagaut 91
						Baulch 94
CH4+CH2(S) \leftrightarrow CH3+CH3		4.2E13	0.	0.	(20,-20)	Tsang 86
Réactions de •C2H						
C2H+CH2(S) \leftrightarrow C2H2+CH		1.8E13	0.	0.	(21,-21)	Tsang 86
C2H+CH2(T) \leftrightarrow C2H2+CH		1.8E13	0.	0.	(22,-22)	Tsang 86
C2H+CH4 \leftrightarrow C2H2+CH3		1.2E12	0.	0.	(23,-23)	Baulch 94
Réactions de C2H2						
C2H2(+M) \leftrightarrow C2H+H(+M)		1.14E17	0.	107.0E3	(24,-24)	Baulch 94
O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/C ₂ H ₆ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/						
C2H2+H \leftrightarrow C2H+H2		6.6E13	0.	27.7E3	(25,-25)	Baulch 94
Réactions de •C2H3						
C2H3(+M) \leftrightarrow C2H2+H(+M)	k _∞	2.0E14	0.	39.8E3	(26,-26)	Baulch 94
	k ₀	4.1E41	-7.5	45.3E3		
	coefficients de Troe:	0.35	1.	1.E8		
O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/						

$C_2H_3+H \leftrightarrow C_2H_2+H_2$	1.2E13	0.	0.	(27,-27)	<i>Baulch 94</i>
$C_2H_3+CH_2(S) \leftrightarrow C_2H_2+CH_3$	1.8E13	0.	0.	(28,-28)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_3+CH_2(T) \leftrightarrow C_2H_2+CH_3$	1.8E13	0.	0.	(29,-29)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_3+CH_3 \leftrightarrow CH_4+C_2H_2$	3.9E11	0.	0.	(30,-30)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_3+C_2H \leftrightarrow 2C_2H_2$	9.6E11	0.	0.	(31,-31)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_3+C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_4+C_2H_2$	9.6E11	0.	0.	(32,-32)	<i>Tsang 86</i>

Réactions de C₂H₄

$C_2H_4+M \leftrightarrow C_2H_2+H_2+M$	1.0E16	0.	71.6E3	(33,-33)	<i>Baulch 94</i>
O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/C ₂ H ₆ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/					
$C_2H_4+M \leftrightarrow C_2H_3+H+M$	7.4E17	0.	96.7E3	(34,-34)	<i>Baulch 94</i>
O ₂ /0.4/CO/0.75/CO ₂ /1.5/H ₂ O/6.5/CH ₄ /3.0/C ₂ H ₆ /3.0/Ar/0.35/N ₂ /0.4/He/0.35/					
$C_2H_4+H \leftrightarrow C_2H_3+H_2$	5.0E7	1.93	13.0E3	(35,-35)	<i>Slagle 96</i>
$C_2H_4+CH_3 \leftrightarrow CH_4+C_2H_3$	6.3E11	0.	16.0E3	(36,-36)	<i>Back89</i>

Réactions de •C₂H₅

$C_2H_5(+M) \leftrightarrow C_2H_4+H(+M)$	k_{∞}	8.2E13	0.	40.0E3	(37,-37)	<i>Baulch 94</i>
	k_0	1.0E18	0.	33.3E3		
	coefficients de Troe:	0.75	97	1379		
$C_2H_5+H \leftrightarrow C_2H_4+H_2$	1.8E12	0.	0.	(38,-38)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+H \leftrightarrow C_2H_6$	3.6E13	0.	0.	(39,-39)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+CH_2(S) \leftrightarrow C_2H_4+CH_3$	9.0E12	0.	0.	(40,-40)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+CH_2(T) \leftrightarrow C_2H_4+CH_3$	1.8E13	0.	0.	(41,-41)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+CH_3 \leftrightarrow C_2H_4+CH_4$	1.1E12	0.	0.	(42,-42)	<i>Baulch 94</i>	
$C_2H_5+C_2H \leftrightarrow C_2H_2+C_2H_4$	1.8E12	0.	0.	(43,-43)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+C_2H_3 \leftrightarrow 2C_2H_4$	4.8E11	0.	0.	(44,-44)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_2+C_2H_6$	4.8E11	0.	0.	(45,-45)	<i>Tsang 86</i>	
$C_2H_5+C_2H_5 \leftrightarrow C_2H_4+C_2H_6$	1.4E12	0.	0.	(46,-46)	<i>Baulch 94</i>	

Réactions de C₂H₆

$C_2H_6+M \leftrightarrow C_2H_4+H_2+M$	2.3E17	0.	67.4E3	(47,-47)	<i>Schultz 85 Nist</i>
$C_2H_6+H \leftrightarrow C_2H_5+H_2$	1.4E9	1.5	7.4E3	(48,-48)	<i>Baulch 94</i>
$C_2H_6+CH_2(S) \leftrightarrow CH_3+C_2H_5$	1.1E14	0.	0.	(49,-49)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_6+CH_3 \leftrightarrow C_2H_5+CH_4$	1.5E-7	6.0	5.8E3	(50,-50)	<i>Baulch 94</i>
$C_2H_6+C_2H \leftrightarrow C_2H_2+C_2H_5$	3.6E12	0.	0.	(51,-51)	<i>Tsang 86</i>
$C_2H_6+C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_5+C_2H_4$	6.0E2	3.3	10.5E3	(52,-52)	<i>Tsang 86</i>

Réactions des espèces oxygénées**Réactions de •O•**

$O+H_2 \leftrightarrow OH+H$	5.1E4	2.67	6.2E3	(53,-53)	<i>Baulch 94</i>
$O+CH \leftrightarrow CO+H$	3.9E13	0.	0.	(54,-54)	<i>Baulch 94</i>
$O+CH \leftrightarrow C+OH$	1.5E13	0.	4.7E3	(55,-55)	<i>Murrell 86 Nist</i>
$O+CH_2(S) \rightarrow CO+2H$	1.5E13	0.	0.	(56)	<i>Tsang 86</i>
$O+CH_2(S) \leftrightarrow CO+H_2$	1.5E13	0.	0.	(57,-57)	<i>Tsang 86</i>
$O+CH_2 \rightarrow CO+2H$	7.2E13	0.	0.	(58)	<i>Baulch 94</i>
$O+CH_2 \leftrightarrow CO+H_2$	4.8E13	0.	0.	(59,-59)	<i>Baulch 94</i>
$O+CH_3 \leftrightarrow CH_2O+H$	8.4E13	0.	0.	(60,-60)	<i>Baulch 94</i>
$O+CH_3 \leftrightarrow CH_3O$	8.0E15	-2.12	0.6E3	(61,-61)	<i>Dean 87 Nist</i>
$O+CH_4 \leftrightarrow CH_3+OH$	7.2E8	1.56	8.4E3	(62,-62)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H \leftrightarrow CH+CO$	1.0E13	0.	0.	(63,-63)	<i>Dagaut 91</i>

Annexe II

$O+C_2H_2 \leftrightarrow HCCO+H$	5.06E06	2.1	1.6E3	(64,-64)	<i>Baulch Leeds</i>
$O+C_2H_2 \leftrightarrow CH_2(T)+CO$	2.17E06	2.1	1.6E3	(65,-65)	<i>Baulch Leeds</i>
$O+C_2H_3 \leftrightarrow CH_3+CO$	3.0E13	0.	0.	(66,-66)	<i>Dagaut 91</i>
$O+C_2H_3 \leftrightarrow CH_2CO+H$	9.6E13	0.	0.	(67)	<i>Tsang 86</i>
$O+C_2H_4 \leftrightarrow CH_3+HCO$	8.1E6	1.88	0.2E3	(68,-68)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_4 \leftrightarrow CH_2O+CH_2(T)$	4.0E5	1.88	0.2E3	(69,-69)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_4 \leftrightarrow CH_2CO+H_2$	6.6E5	1.88	0.2E3	(70)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_4 \leftrightarrow CH_2CHO+H$	4.7E6	1.88	0.2E3	(71,-71)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_4 \leftrightarrow OH+C_2H_3$	1.5E7	1.91	3.7E3	(72,-72)	<i>Mahmud 87 Nist</i>
$O+C_2H_5 \leftrightarrow CH_2O+CH_3$	1.1E13	0.	0.	(73,-73)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_5 \leftrightarrow CH_3CHO+H$	5.5E13	0.	0.	(74,-74)	<i>Baulch 94</i>
$O+C_2H_5 \leftrightarrow C_2H_4+OH$	3.0E13	0.	0.	(75,-75)	<i>Dagaut 91</i>
$O+C_2H_6 \leftrightarrow C_2H_5+OH$	1.0E9	1.5	5.8E3	(76,-76)	<i>Baulch 94</i>

Réactions de •OH

$O+H+M \leftrightarrow OH+M$	1.18E19	-1.0	0.0	(77,-77)	<i>Baulch 94</i>	
$O_2/0.4/ CO/0.75/ CO_2/1.5/ H_2O/6.5/ CH_4/3.0/ C_2H_6/3.0/ Ar/0.35/ N_2/0.4/ He/0.35/$						
$OH+H+M \leftrightarrow H_2O+M$	5.53E+22	-2.0	0.0	(78,-78)	<i>Baulch 94</i>	
$O_2/0.4/ CO/0.75/ CO_2/1.5/ H_2O/2.55/ CH_4/3.0/ C_2H_6/3.0/ Ar/0.15/ N_2/0.4/ He/0.35/$						
$OH+H_2 \leftrightarrow H+H_2O$	1.0E8	1.6	3.3E3	(79,-79)	<i>Baulch 94</i>	
$OH+C \leftrightarrow CO+H$	5.0E13	0.	0.	(80,-80)	<i>Ranzi 94</i>	
$OH+CH \leftrightarrow HCO+H$	3.0E13	0.	0.	(81,-81)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+CH_2(S) \leftrightarrow CH_2O+H$	3.0E13	0.	0.	(82,-82)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+CH_2(T) \leftrightarrow CH_2O+H$	1.8E13	0.	0.	(83,-83)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+CH_3 \leftrightarrow CH_2(S)+H_2O$	7.2E13	0.	2.7E3	(84,-84)	<i>Baulch 94</i>	
$OH+CH_3(+M) \leftrightarrow CH_3OH(+M)$	k_{∞} k_0	6.0E13	0.	0.	(85,-85)	<i>Baulch 94</i>
	coefficients de Troe:	1.6E44	-8.2	0.		
			0.82	200	1438	
$OH+CH_3 \leftrightarrow CH_2O+H_2$	3.2E12	-0.53	10.8E3	(86,-86)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+CH_3 \leftrightarrow CH_3O+H$	5.7E12	-0.23	13.9E3	(87,-87)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+CH_4 \leftrightarrow CH_3+H_2O$	1.6E7	1.83	2.7E3	(88,-88)	<i>Baulch 94</i>	
$OH+C_2H \leftrightarrow C_2H_2+O$	1.8E13	0.	0.	(89,-89)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H \leftrightarrow CH_2+CO$	1.8E13	0.	0.	(90,-90)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H \leftrightarrow HCCO+H$	2.0E13	0.	0.	(91,-91)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+C_2H_2 \leftrightarrow C_2H+H_2O$	1.4E4	2.68	12.0E3	(92,-92)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H_2 \leftrightarrow CH_2CO+H$	2.2E-4	4.5	-1.0E3	(93,-93)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+C_2H_2 \leftrightarrow CH_3+CO$	4.8E-4	4.	-2.0E3	(94,-94)	<i>Dagaut 91</i>	
$OH+C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_2+H_2O$	3.0E13	0.	0.	(95,-95)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H_3 \leftrightarrow CH_3CHO$	3.0E13	0.	0.	(96,-96)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H_4 \leftrightarrow C_2H_3+H_2O$	2.0E13	0.	5.9E3	(97,-97)	<i>Baulch 94</i>	
$OH+C_2H_4 \leftrightarrow CH_3+CH_2O$	2.0E12	0.	0.9E3	(98,-98)	<i>Glarborg 86 Nist</i>	
$OH+C_2H_5 \leftrightarrow C_2H_4+H_2O$	2.4E13	0.	0.	(99,-99)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H_5 \rightarrow CH_3+H+CH_2O$	2.4E13	0.	0.	(100)	<i>Tsang 86</i>	
$OH+C_2H_6 \leftrightarrow C_2H_5+H_2O$	7.2E6	2.	0.9E3	(101,-101)	<i>Baulch 94</i>	
$OH+OH \leftrightarrow H_2O+O$	1.5E9	1.14	0.1E3	(102,-102)	<i>Baulch 94</i>	

Réactions de H₂O

$H_2O+CH \leftrightarrow CH_2OH$	5.7E12	0.	-0.8E3	(103,-103)	<i>Baulch 94</i>
$H_2O+CH_2(S) \leftrightarrow CH_3OH$	1.8E13	0.	0.	(104,-104)	<i>Tsang 86</i>

Réactions de CO

CO+CH3(+M)↔CH3CO(+M)	k_{∞}	5.0E11	0.	6.9E3	(105,-105)	<i>Baulch 94</i>
	k_0	1.1E14	0.	3.8E3		
	coefficients de Troe:		0.5	1.	1.0E8	
CO+O+M ↔CO2+M		1.54E15	0.	3.0E3	(106,-106)	<i>Tsang 86</i>
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/ N ₂ /0.4/ He/0.35/						
CO+OH↔CO2+H		6.3E6	1.5	-0.5E3	(107,-107)	<i>Baulch 94</i>

Réactions de HC(•)O

HCO+M↔H+CO+M		1.9E17	-1.	17.0E3	(108,-108)	<i>Wang 97</i>
HCO+H↔H2+CO		9.0E13	0.	0.	(109,-109)	<i>Baulch 94</i>
HCO+H↔O+CH2		4.0E13	0.	102.5E3	(110,-110)	<i>Tsuboi 81 Nist</i>
HCO+CH2(S)↔CH3+CO		1.8E13	0.	0.	(111,-111)	<i>Tsang 86</i>
HCO+CH2(T)↔CH3+CO		1.8E13	0.	0.	(112,-112)	<i>Tsang 86</i>
HCO+CH3↔CH4+CO		1.2E14	0.	0.	(113,-113)	<i>Tsang 86</i>
HCO+CH3↔CH3CHO		1.8E13	0.	0.	(114,-114)	<i>Tsang 86</i>
CH3+CH2O↔HCO+CH4		7.7E-8	6.1	1.97E3	(115,-115)	<i>Baulch 94</i>
HCO+C2H↔C2H2+CO		6.0E13	0.	0.	(116,-116)	<i>Tsang 86</i>
HCO+C2H3↔C2H4+CO		9.0E13	0.	0.	(117,-117)	<i>Tsang 86</i>
C2H3+CH2O↔HCO+C2H4		5.4E3	2.81	5.86E3	(118,-118)	<i>Tsang 86</i>
HCO+C2H5↔C2H6+CO		1.2E14	0.	0.	(119,-119)	<i>Tsang 86</i>
C2H5+CH2O↔HCO+C2H6		5.5E3	2.81	5.86E3	(120,-120)	<i>Tsang 86</i>
HCO+O↔H+CO2		3.0E13	0.	0.	(121,-121)	<i>Baulch 94</i>
HCO+O↔OH+CO		3.0E13	0.	0.	(122,-122)	<i>Baulch 94</i>
HCO+OH↔H2O+CO		1.1E14	0.	0.	(123,-123)	<i>Baulch 94</i>
HCO+HCO↔CH2O+CO		3.0E13	0.	0.	(124,-124)	<i>Baulch 94</i>

Réactions de CH2O

CH2O+M↔HCO+H+M		1.40E36	-5.54	96.8E3	(125,-125)	<i>Baulch 94</i>
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/ N ₂ /0.4/ He/0.35/						
CH2O+M↔CO+H2+M		3.26E36	-5.54	96.8E3	(126,-126)	<i>Baulch 94</i>
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/ N ₂ /0.4/ He/0.35/						
CH2O+H↔HCO+H2		1.3E8	1.62	2.1E3	(127,-127)	<i>Baulch 94</i>
CH2O+CH↔CH2CHO		9.6E13	0.	-0.5E3	(128,-128)	<i>Baulch 94(a)</i>
CH2O+CH2(S)↔CH3+HCO		1.2E12	0.	0.	(129,-129)	<i>Tsang 86</i>
CH2O+O↔HCO+OH		4.1E11	0.57	2.7E3	(130,-130)	<i>Baulch 94</i>
CH2O+OH↔HCO+H2O		3.4E9	1.18	-0.4E3	(131,-131)	<i>Baulch 94</i>

Réactions de CH3O•

CH3O+M↔CH2O+H+M		1.55E14	0.	13.5E3	(132,-132)	<i>Baulch 94</i>
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/ N ₂ /0.4/ He/0.35/						
CH3O+H↔CH2O+H2		1.8E13	0.	0.	(133,-133)	<i>Baulch 94</i>
CH3O+CH2(S)↔CH3+CH2O		1.8E13	0.	0.	(134,-134)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+CH2(T)↔CH3+CH2O		1.8E13	0.	0.	(135,-135)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+CH3↔CH2O+CH4		2.4E13	0.	0.	(136,-136)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+CH4↔CH3+CH3OH		1.6E11	0.	8.8E3	(137,-137)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+C2H↔CH2O+C2H2		2.4E13	0.	0.	(138,-138)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+C2H3↔CH2O+C2H4		2.4E13	0.	0.	(139,-139)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+C2H4↔CH2O+C2H5		1.2E11	0.	6.7E3	(140,-140)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+C2H5↔CH2O+C2H6		2.4E13	0.	0.	(141,-141)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+C2H6↔CH2O+C2H5+CH3OH		2.4E11	0.	7.0E3	(142,-142)	<i>Tsang 86</i>
CH3O+O↔CH2O+OH		1.8E12	0.	0.	(143,-143)	<i>Baulch 94</i>

$\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	1.8E13	0.	0.	(144,-144)	<i>Tsang 86</i>
$\text{CH}_3\text{O}+\text{CO}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CO}_2$	1.6E13	0.	11.7E3	(145,-145)	<i>Tsang 86</i>
$\text{CH}_3\text{O}+\text{HCO}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CO}$	9.1E13	0.	0.	(146,-146)	<i>Tsang 86</i>
$\text{CH}_3\text{O}+\text{CH}_2\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{HCO}$	1.0E11	0.	3.0E3	(147,-147)	<i>Tsang 86</i>
$\text{CH}_3\text{O}+\text{CH}_3\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$	6.0E13	0.	0.	(148,-148)	<i>Tsang 86</i>

Réactions de •CH₂OH

$\text{CH}_2\text{OH}+\text{M}\leftrightarrow\text{H}+\text{CH}_2\text{O}+\text{M}$	1.26E16	0.	30.0E3	(149,-149)	<i>Baulch 94</i>
$\text{O}_2/0.4/ \text{CO}/0.75/ \text{CO}_2/1.5/ \text{H}_2\text{O}/6.5/ \text{CH}_4/3.0/ \text{C}_2\text{H}_6/3.0/ \text{Ar}/0.35/ \text{N}_2/0.4/ \text{He}/0.35/$					
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{OH}$	9.6E13	0.	0.	(150,-150)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{H}_2$	6.0E12	0.	0.	(151,-151)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}$	6.7E5	2.	13.4E3	(152,-152)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_2(\text{S})\leftrightarrow\text{CH}_3\text{CHO}+\text{H}$	1.8E13	0.	0.	(153,-153)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{OH}$	2.4E13	0.	0.	(154,-154)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CH}_2\text{O}$	1.2E12	0.	0.	(155,-155)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	1.2E13	0.	0.	(156,-156)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_3\leftrightarrow\text{CH}_4+\text{CH}_2\text{O}$	2.4E12	0.	0.	(157,-157)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_4\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_3$	21.7	3.1	16.2E3	(158,-158)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_2\text{O}$	4.8E13	0.	0.	(159,-159)	<i>Tsang 87(a)</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_2\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_3+\text{CH}_2\text{O}$	7.2E11	0.	9.0E3	(160,-160)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{CH}_2\text{O}$	4.2E13	0.	0.	(161,-161)	<i>Tsang 87(a)</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_5\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{CH}_3\text{OH}$	2.4E12	0.	0.	(162,-162)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_5\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_6+\text{CH}_2\text{O}$	2.4E12	0.	0.	(163,-163)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_6\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_5$	199.	3.	14.0E3	(164,-164)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}$	4.2E13	0.	0.	(165,-165)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{OH}\leftrightarrow\text{H}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$	2.4E13	0.	0.	(166,-166)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{HCO}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CO}$	1.2E14	0.	0.	(167,-167)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{HCO}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$	1.8E14	0.	0.	(168,-168)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{HCO}$	5.5E3	2.8	5.9E3	(169,-169)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$	2.4E13	0.	0.	(170,-170)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_2\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{HCHO}$	1.4E13	0.	0.	(171,-171)	<i>Tsang 87</i>

Réactions de CH₃OH

$\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	2.0E14	0.	5.3E3	(172,-172)	<i>Hidaka 89 Nist</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2$	4.2E6	2.1	4.9E3	(173,-173)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2(\text{S})\leftrightarrow\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_3$	1.5E12	0.	0.	(174,-174)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CH}_2\text{OH}$	31.9	3.2	7.2E3	(175,-175)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2\leftrightarrow\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{O}$	14.4	3.1	6.9E3	(176,-176)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{C}_2\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_2\text{OH}$	6.0E12	0.	0.	(177,-177)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{C}_2\text{H}\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_2+\text{CH}_3\text{O}$	1.2E12	0.	0.	(178,-178)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{CH}_2\text{OH}$	31.9	3.2	7.2E3	(179,-179)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_3\leftrightarrow\text{C}_2\text{H}_4+\text{CH}_3\text{O}$	14.4	3.1	6.9E3	(180,-180)	<i>Tsang 87</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{OH}+\text{OH}$	3.4E13	0.	5.5E3	(181,-181)	<i>Grotheer 81 Nist</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$	1.0E13	0.	4.7E3	(182,-182)	<i>Warnatz 84</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	3.1E6	2.	-3.4E2	(183,-183)	<i>Atkinson86</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{OH}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	5.4E5	2.	-3.4E2	(184,-184)	<i>Atkinson86</i>
$\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}\leftrightarrow\text{CH}_3\text{OH}+\text{CH}_2\text{OH}$	3.0E11	0.	4.1E3	(185,-185)	<i>Tsang 87</i>

Réactions de HCCO

$\text{HCCO}+\text{M}\leftrightarrow\text{CH}+\text{CO}+\text{M}$	6.0E15	0.	58.8E3	(186,-186)	<i>Dagaut 91</i>
$\text{HCCO}+\text{H}\leftrightarrow\text{CH}_2(\text{T})+\text{CO}$	1.5E14	0.	0.	(187,-187)	<i>Baulch 94</i>

HCCO+H \leftrightarrow CH ₂ (S)+CO	1.3E14	0.	0.	(188,-188)	Peeters 97
HCCO+CH ₂ (T) \leftrightarrow C ₂ H+CH ₂ O	1.0E13	0.	2.0E3	(189,-189)	Dagaut 91
HCCO+CH ₂ (T) \leftrightarrow C ₂ H ₃ +CO	3.0E13	0.	0.	(190,-190)	Dagaut 91
HCCO+O \rightarrow CO+CO+H	9.6E13	0.	0.	(191)	Baulch 94
HCCO+OH \rightarrow HCO+CO+H	1.0E13	0.	0.	(192,-192)	Dagaut 91

Réactions de •CH₂CO

CH ₂ CO+M \leftrightarrow CH ₂ (S)+CO+M	6.57E15	0.	57.6E3	(193,-193)	Frank 86 Nist
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/N ₂ /0.4/ He/0.35/ CH ₂ CO+M \leftrightarrow HCCO+H+M	2.7E17	0.	87E3.	(194,-194)	Frank 86 Nist
O ₂ /0.4/ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/ CH ₄ /3.0/ C ₂ H ₆ /3.0/ Ar/0.35/ N ₂ /0.4/ He/0.35/ CH ₂ CO+H \leftrightarrow CH ₃ +CO	1.8E13	0.	3.4E3	(195,-195)	Baulch 94
CH ₂ CO+H \leftrightarrow HCCO+H ₂	5.0E13	0.	8.0E3	(196,-196)	Dagaut 91
CH ₂ CO+CH ₂ \leftrightarrow C ₂ H ₄ +CO	1.3E14	0.	0.	(197,-197)	Canosa-Mas 84
CH ₂ CO+O \leftrightarrow CH ₂ +CO ₂	1.8E12	0.	1.3E3	(198,-198)	Dagaut 91
CH ₂ CO+O \leftrightarrow HCCO+OH	1.0E13	0.	8.0E3	(199,-199)	Dagaut 91
CH ₂ CO+OH \leftrightarrow HCCO+H ₂ O	7.5E12	0.	2.0E3	(200,-200)	Dagaut 91
CH ₂ CO+R ₂ OH \leftrightarrow CH ₃ +CO ₂	2.52E12	0.	0.	(201,-201)	Baulch Leeds
CH ₂ CO+R ₂ OH \leftrightarrow R ₆ CH ₂ OH+B ₂ CO	4.68E12	0.	0.	(202,-202)	Baulch Leeds

Réactions de CH₃C(•)O

CH ₃ CO+H \leftrightarrow CH ₃ +HCO	9.6E13	0.	0.	(203,-203)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₂ (S) \leftrightarrow CH ₃ +CH ₂ CO	1.8E13	0.	0.	(204,-204)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₂ (T) \leftrightarrow CH ₃ +CH ₂ CO	1.8E13	0.	0.	(205,-205)	Tsang 86
CH ₃ CO+O \leftrightarrow CH ₃ +CO ₂	9.6E12	0.	0.	(206,-206)	Tsang 86
CH ₃ CO+OH \leftrightarrow CH ₂ CO+H ₂ O	1.2E13	0.	0.	(207,-207)	Tsang 86
CH ₃ CO+OH \rightarrow CH ₃ +CO+OH	3.0E13	0.	0.	(208,-208)	Tsang 86
CH ₃ CO+HCO \leftrightarrow CH ₃ CHO+CO	9.0E12	0.	0.	(209,-209)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₂ O \leftrightarrow CH ₃ CHO+HCO	1.8E11	0.	12.9E3	(210,-210)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₃ O \leftrightarrow CH ₃ OH+CH ₂ CO	6.0E12	0.	0.	(211,-211)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₃ O \leftrightarrow CH ₂ O+CH ₃ CHO	6.0E12	0.	0.	(212,-212)	Tsang 86
CH ₃ CO+CH ₃ OH \leftrightarrow CH ₃ CHO+CH ₂ OH	4.85E3	3.	12.3E3	(213,-213)	Tsang 87
CH ₃ CO+CH ₃ CO \leftrightarrow CH ₃ CHO+CH ₂ CO	1.2E13	0.	0.	(214,-214)	Tsang 86

Réactions de •CH₂CHO

CH ₂ CHO \leftrightarrow CH ₃ CO	1.0E13	0.	47.0E3	(215,-215)	Colket 75 Nist
CH ₂ CHO \leftrightarrow H+CH ₂ CO	1.6E13	0.	35.0E3	(216,-216)	Colket 75 Nist

Réactions de CH₃CHO

CH ₃ CHO+H \leftrightarrow H ₂ +CH ₃ CO	4.0E13	0.	4.2E3	(217,-217)	Warnatz 84
CH ₃ CHO+CH ₃ \leftrightarrow CH ₃ CO+CH ₄	2.0E-6	5.6	2.5E3	(218,-218)	Baulch 94
CH ₃ CHO+C ₂ H ₃ \leftrightarrow C ₂ H ₄ +CH ₃ CO	8.1E10	0.	3.7E3	(219,-219)	Scherzer 87 Nist
CH ₃ CHO+C ₂ H ₅ \leftrightarrow C ₂ H ₆ +CH ₃ CO	1.3E12	0.	8.5E3	(220,-220)	Hohlein 70 Nist
CH ₃ CHO+O \leftrightarrow CH ₃ CO+OH	1.4E13	0.	2.3E3	(221,-221)	Cavanagh 90
CH ₃ CHO+OH \leftrightarrow CH ₃ CO+H ₂ O	4.2E12	0.	0.5E3	(222,-222)	Cavanagh 90
CH ₃ CHO+CH ₃ O \leftrightarrow CH ₃ CO+CH ₃ OH	2.4E11	0.	1.8E3	(223,-223)	Cavanagh 90
CH ₃ CHO+CH ₂ CHO \leftrightarrow CH ₃ CHO+CH ₃ CO	2.5E7	0.	0.	(224,-224)	Schuchmann 70

Réactions de C₂H₄O

C ₂ H ₄ O \leftrightarrow CH ₄ +CO	1.2E13	0.	57.2E3	(225,-225)	Lifshitz 83 Nist
C ₂ H ₄ O \leftrightarrow CH ₃ CHO	7.3E13	0.	57.2E3	(226,-226)	Lifshitz 83 Nist

$C_2H_4O \leftrightarrow CH_3 + HCO$	3.6E13	0.	57.2E3	(227,-227)	<i>Lifshitz 83 Nist</i>
$C_2H_4O + H \leftrightarrow H_2 + CH_2CHO$	2.0E13	0.	8.3E3	(228,-228)	<i>Lifshitz 83 Nist</i>
$C_2H_4O + H \leftrightarrow H_2O + C_2H_3$	5.0E9	0.	5.0E3	(229,-229)	<i>Lifshitz 83 Nist</i>
$C_2H_4O + H \leftrightarrow C_2H_4 + OH$	9.5E10	0.	5.0E3	(230,-230)	<i>Lifshitz 83 Nist</i>
$C_2H_4O + CH_3 \leftrightarrow CH_4 + CH_2CHO$	1.1E12	0.	11.8E3	(231,-231)	<i>Baldwin 84</i>
$C_2H_4O + CH_3 \leftrightarrow C_2H_5 + CH_2O$	1.4E11	0.	7.6E3	(232,-232)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + CH_3 \leftrightarrow C_2H_4 + CH_3O$	1.5E10	0.	7.6E3	(233,-233)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + C_2H \leftrightarrow C_2H_2 + CH_2CHO$	1.2E12	0.	9.8E3	(234,-234)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_4 + CH_2CHO$	2.0E12	0.	9.3E3	(235,-235)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + C_2H_5 \leftrightarrow C_2H_6 + CH_2CHO$	6.8E11	0.	11.4E3	(236,-236)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + O \leftrightarrow OH + CH_2CHO$	1.9E12	0.	5.2E3	(237,-237)	<i>Bogan 78 Nist</i>
$C_2H_4O + OH \leftrightarrow H_2O + CH_2CHO$	1.8E13	0.	3.6E3	(238,-238)	<i>Baldwin 84 Nist</i>
$C_2H_4O + HCO \leftrightarrow CH_2O + CH_2CHO$	3.7E12	0.	15.8E3	(239,-239)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + CH_3O \leftrightarrow CH_3OH + CH_2CHO$	1.3E12	0.	5.8E3	(240,-240)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + CH_2OH \leftrightarrow CH_3OH + CH_2CHO$	8.4E11	0.	13.4E3	(241,-241)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + CH_3CO \leftrightarrow CH_3CHO + CH_2CHO$	4.0E12	0.	17.5E3	(242,-242)	<i>Ranzi 94</i>
$C_2H_4O + CH_2CHO \leftrightarrow CH_3CHO + CH_2CHO$	6.8E11	0.	15.4E3	(243,-243)	<i>Ranzi 94</i>

Réactions de C₂H₅O•

$C_2H_5O \leftrightarrow CH_2O + CH_3$	8.0E13	0.	21.5E3	(244,-244)	<i>Baulch 94</i>
$C_2H_5O \leftrightarrow CH_3CHO + H$	2.0E14	0.	23.3E3	(245,-245)	<i>Heicklen 88 Nist</i>

Réactions de C₂H₅OH (d)

$C_2H_5OH(+M) \leftrightarrow C_2H_5 + OH(+M)$	k_∞	1.2E+23	-1.54	96.0E3	(246,-246)	<i>Marinov99</i>
	k_0	3.2E85	-18.81	114.9E3		
	coefficients de Troe /0.5					
			300.0	9.0E2	5.0E3/.	
$C_2H_5OH(+M) \leftrightarrow C_2H_4 + H_2O(+M)$	k_∞	2.8E+13	0.09	66.1E3	(247,-247)	<i>Marinov99</i>
	k_0	2.6E83	-18.85	86.5E3		
	coefficients de Troe /0.7					
			350.0	8.0E2	3.8E3/.	
$C_2H_5OH(+M) \leftrightarrow CH_3CHO + H_2(+M)$	k_∞	7.2E+11	0.095	91.0E3	(248,-248)	<i>Marinov99</i>
	k_0	4.5E87	-19.42	115.6E3		
	coefficients de Troe /0.9					
			900.0	1.1E3	3.5E3/.	
$C_2H_5OH + H \leftrightarrow H_2 + C_2H_5O$	1.5E07	1.6	3.04E3	(249,-249)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + O \leftrightarrow OH + C_2H_5O$	1.6E07	2.0	4.45E3	(250,-250)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + OH \leftrightarrow H_2O + C_2H_5O$	7.5E11	0.3	1.6E3	(251,-251)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + OOH \leftrightarrow H_2O_2 + C_2H_5O$	2.5E12	0.	24.0E3	(252,-252)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + CH_3 \leftrightarrow CH_4 + C_2H_5O$	1.4E02	2.99	7.65E3	(253,-253)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + H \leftrightarrow H_2 + H + CH_3CHO$	2.6E07	1.65	2.8E3	(254,-254)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + H \leftrightarrow H_2 + OH + C_2H_4$	1.2E07	1.8	5.1E3	(255,-255)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + O \leftrightarrow OH + H + CH_3CHO$	1.9E07	1.85	1.82E3	(256,-256)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + O \leftrightarrow OH + OH + C_2H_4$	9.4E07	1.7	5.46E3	(257,-257)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + OH \leftrightarrow H_2O + H + CH_3CHO$	4.6E11	0.15	0.	(258,-258)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + OH \leftrightarrow H_2O + OH + C_2H_4$	1.7E11	0.27	0.6E3	(259,-259)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + CH_3 \leftrightarrow CH_4 + H + CH_3CHO$	7.3E02	2.99	7.9E3	(260,-260)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + CH_3 \leftrightarrow CH_4 + OH + C_2H_4$	2.2E02	3.18	9.6E3	(261,-261)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + HO_2 \leftrightarrow H_2O_2 + OH + C_2H_4$	1.2E04	2.55	15.7E3	(262,-262)	<i>Marinov99</i>	
$C_2H_5OH + HO_2 \leftrightarrow H_2O_2 + CH_3CHO + H$	8.2E03	2.55	10.7E3	(263,-263)	<i>Marinov99</i>	

Réactions de O2

O+O+M \leftrightarrow O2+M	5.40E13	0.	-1.79E3	(264,-264)	<i>Baulch 94</i>
	O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ CH4/3.0/ C2H6/3.0/ Ar/0.35/ N2/0.4/ He/0.35/				
O2+H \leftrightarrow OH+O	9.8E13	0.	14.8E3	(265,-265)	<i>Baulch 94</i>
O2+H(+M) \leftrightarrow HO2(+M)	k $_{\infty}$	4.52E23	0.	0.	(266,-266) <i>Cobos85</i>
	k ₀	1.8E18	-0.8	0.	<i>Baulch 94</i>
	coefficients de Troe /0.5 1.0 1.0E8/ O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/0.0/ CH4/3.0/ C2H6/3.0/ Ar/0.29/				
O2+H(+H2O) \leftrightarrow HO2(+H2O)	k $_{\infty}$	4.52E23	0.	0.	(267,-267) <i>Cobos85</i>
	k ₀	6.9E15	0.	-2.1E3.	
	coefficients de Troe /0.45 1.0 1.0E8 / O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/0.0/ CH4/3.0/ C2H6/3.0/ Ar/0.29/				
O2+C \leftrightarrow CO+O	1.2E14	0.	0.	(268,-268)	<i>Ranzi 94</i>
O2+CH \leftrightarrow HCO+O	3.3E13	0.	0.	(269,-269)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH \leftrightarrow CO+OH	3.2E13	0.	0.	(270,-270)	<i>Peeters 97</i>
O2+CH2(S) \rightarrow CO+OH+H	3.1E12	0.	0.	(271)	<i>Baulch 94</i>
O2+CH2(T) \leftrightarrow HCO+OH	4.3E10	0.	-0.5E3	(272,-272)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2(T) \leftrightarrow CO2+H2	6.9E11	0.	0.5E3	(273,-273)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2(T) \rightarrow CO2+H+H	1.6E12	0.	1.0E3	(274)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2(T) \leftrightarrow CO+H2O	1.9E10	0.	-1.0E3	(275,-275)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2(T) \rightarrow CO+OH+H	8.6E10	0.	-0.5E3	(276)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2(T) \leftrightarrow CH2O+O	1.0E14	0.	4.5E3	(277,-277)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH3(+M) \leftrightarrow CH3O2(+M)	k $_{\infty}$	7.8E8	1.2	0.	(278,-278) <i>Baulch 94</i>
	ko	5.6E25	-3.3	0.	
	coefficients de Troe: 0.36 1 1.0E8				
O2+CH3 \leftrightarrow CH3O+O	1.3E14	0.	31.3E3	(279,-279)	<i>Baulch 94</i>
O2+CH3 \leftrightarrow CH2O+OH	3.0E30	-4.69	36.6E3	(280,-280)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH4 \leftrightarrow CH3+HO2	4.0E13	0.	56.7E3	(281,-281)	<i>Baulch 94</i>
O2+C2H \leftrightarrow CO+HCO	3.8E13	-0.16	0.	(282,-282)	<i>Tiesemann97/ Tsang86</i>
O2+C2H \leftrightarrow HCCO+O	9.0E12	-0.16	0.	(283,-283)	<i>Tiesemann97/ Tsang86</i>
O2+C2H2 \leftrightarrow C2H+HO2	1.2E13	0.	74.5E3	(284,-284)	<i>Tsang 86</i>
O2+C2H2 \leftrightarrow HCO+HCO	7.0E7	1.8	30.6E3	(285,-285)	<i>Benson 95</i>
O2+C2H3 \leftrightarrow C2H2+HO2	1.34E6	1.61	-0.4E3	(286,-286)	<i>Mebel Nist</i>
O2+C2H3 \leftrightarrow CH2O+HCO	4.5E16	-1.39	1.0E3	(287,-287)	<i>Mebel Nist</i>
O2+C2H3 \leftrightarrow O+CH2CHO	3.3E11	0.29	10.	(288,-288)	<i>Mebel Nist</i>
O2+C2H4 \leftrightarrow C2H3+HO2	4.2E13	0.	57.4E3	(289,-289)	<i>Tsang 86</i>
O2+C2H5 \leftrightarrow C2H5O2	2.2E10	0.77	-0.6E3	(290,-290)	<i>Wagner 90 Nist</i>
O2+C2H5 \leftrightarrow C2H4+HO2	8.4E11	0.	3.9E3	(291,-291)	<i>Tsang 86</i>
O2+C2H5 \leftrightarrow C2H5O+O	1.2E13	-0.2	27.9E3	(292,-292)	<i>Bozzelli 90 Nist</i>
O2+C2H5 \leftrightarrow CH3CHO+OH	6.0E10	0.	6.9E3	(293,-293)	<i>Tsang 86</i>
O2+C2H6 \leftrightarrow C2H5+HO2	6.0E13	0.	51.7E3	(294,-294)	<i>Baulch 94</i>
O2+OH \leftrightarrow HO2+O	2.2E13	0.	52.5E3	(295,-295)	<i>Tsang 86</i>
O2+CO \leftrightarrow CO2+O	2.5E12	0.	47.7E3	(296,-296)	<i>Tsang 86</i>
O2+HCO \leftrightarrow CO+HO2	7.6E12	0.	0.41E3	(297,-297)	<i>Timonen 88</i>
O2+CH2O \leftrightarrow HCO+HO2	2.0E13	0.	38.8E3	(298,-298)	<i>Tsang 86</i>
O2+CH3O \leftrightarrow CH2O+HO2	2.2E10	0.	1.7E3	(299,-299)	<i>Baulch 94</i>
O2+CH2OH \leftrightarrow CH2O+HO2	1.2E12	0.	0.	(300,-300)	<i>Tsang 87</i>
O2+CH3OH \leftrightarrow CH2OH+HO2	2.0E13	0.	44.9E3	(301,-301)	<i>Tsang 87</i>
O2+HCCO \rightarrow CO+CO+OH	1.5E12	0.	2.5E3	(302)	<i>Dagaut 91</i>
O2+CH2CHO \rightarrow CH2O+OH+CO	5.9E9	0.	-1.4E3	(303)	<i>Cox 90</i>

$O_2+CH_2CHO \leftrightarrow CH_2CO+HO_2$	1.0E10	0.	-1.4E3	(304,-304)	<i>Cox 90</i>
$O_2+CH_3CHO \leftrightarrow CH_3CO+HO_2$	5.0E13	0.	36.4E3	(305,-305)	<i>Cavanagh 90</i>
$O_2+CH_3CHO \leftrightarrow CH_2CHO+HO_2$	1.0E13	0.5	46.0E3	(306,-306)	<i>Ranzi 94</i>
$O_2+C_2H_4O \leftrightarrow HO_2+CH_2CHO$	5.0E13	0.	48.0E3	(307,-307)	<i>Ranzi 94</i>
$O_2+C_2H_5O \leftrightarrow CH_3CHO+HO_2$	6.0E10	0.	1.7E3	(308,-308)	<i>Baulch 94</i>

Réactions de HO₂•

$HO_2+H \leftrightarrow H_2+O_2$	4.3E13	0.	1.4E3	(309,-309)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+H \leftrightarrow 2OH$	1.7E14	0.	0.9E3	(310,-310)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+H \leftrightarrow H_2O+O$	3.0E13	0.	1.7E3	(311,-311)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+CH_2(S) \leftrightarrow CH_2O+OH$	3.0E13	0.	0.	(312,-312)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+CH_2(T) \leftrightarrow CH_2O+OH$	1.8E13	0.	0.	(313,-313)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+CH_3 \leftrightarrow CH_3O+OH$	1.8E13	0.	0.	(314,-314)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+CH_4 \leftrightarrow CH_3+H_2O_2$	9.0E12	0.	24.6E3	(315,-315)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+C_2H \leftrightarrow HCCO+OH$	1.8E13	0.	0.	(316,-316)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_2 \leftrightarrow CH_2CO+OH$	6.0E9	0.	8.0E3	(317,-317)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_3 \rightarrow OH+CH_3+CO$	3.0E13	0.	0.	(318)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_4 \leftrightarrow CH_3CHO+OH$	6.0E9	0.	7.9E3	(319,-319)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_4 \leftrightarrow C_2H_4O+OH$	2.2E12	0.	17.2E3	(320,-320)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+C_2H_5 \rightarrow CH_3+CH_2O+OH$	2.4E13	0.	0.	(321)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_5 \leftrightarrow C_2H_4+H_2O_2$	3.0E11	0.	0.	(322,-322)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+C_2H_6 \leftrightarrow C_2H_5+H_2O_2$	1.3E13	0.	20.4E3	(323,-323)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+OH \leftrightarrow H_2O+O_2$	2.9E13	0.	-0.5E3	(324,-324)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+CO \leftrightarrow CO_2+OH$	1.5E14	0.	23.6E3	(325,-325)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+HCO \rightarrow OH+H+CO_2$	3.0E13	0.	0.	(326)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+CH_2O \leftrightarrow HCO+H_2O_2$	3.0E12	0.	13.0E3	(327,-327)	<i>Baulch 94</i>
$HO_2+CH_3O \leftrightarrow CH_2O+H_2O_2$	3.0E11	0.	0.	(328,-328)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+CH_2OH \leftrightarrow CH_2O+H_2O_2$	1.2E13	0.	0.	(329,-329)	<i>Tsang 87</i>
$HO_2+CH_3OH \leftrightarrow CH_2OH+H_2O_2$	9.6E10	0.	12.6E3	(330,-330)	<i>Tsang 87</i>
$HO_2+CH_3CO \rightarrow CH_3+CO_2+OH$	3.0E13	0.	0.	(331)	<i>Tsang 86</i>
$HO_2+CH_3CHO \leftrightarrow CH_3CO+H_2O_2$	1.0E12	0.	10.0E3	(332,-332)	<i>Cavanagh 90</i>
$HO_2+C_2H_4O \leftrightarrow H_2O_2+CH_2CHO$	1.6E12	0.	15.0E3	(333,-333)	<i>Ranzi 94</i>
$HO_2+HO_2 \leftrightarrow H_2O_2+O_2$	4.2E14	0.	11.98E3	(334,-334)	<i>Baulch 94</i>
La constante est la somme des deux expressions	1.3E11	0.	-1.6E3		

Réactions de H₂O₂

$H_2O_2(+M) \rightarrow OH+OH(+M)$	k_{∞}	3.0E14	0.	48.5E3	(335)	<i>Baulch 94</i>
	k_0	3.0E17	0.	45.5E3		
	coefficients de Troe: / 1		1	1.0E8/		
	$O_2/0.4/ CO/0.75/ CO_2/1.5/ H_2O/6.5/ CH_4/3.0/ C_2H_6/3.0/ Ar/0.35/ N_2/0.4/ He/0.35/$					
$OH+OH(+M) \rightarrow H_2O_2(+M)$	k_{∞}	7.23E13	-0.37	0.0	(-335)	<i>Baulch 94</i>
	k_0	5.53E19	-0.76	0.0		
	coefficients de Troe: 1		1	1.0E8		
	$O_2/0.4/ CO/0.75/ CO_2/1.5/ H_2O/6.5/ CH_4/3.0/ C_2H_6/3.0/ Ar/0.35/ N_2/0.4/ He/0.35/$					
$H_2O_2+H \leftrightarrow H_2+HO_2$	1.7E12	0.	3.7E3	(336,-336)	<i>Baulch 94</i>	
$H_2O_2+H \leftrightarrow H_2O+OH$	1.0E13	0.	3.6E3	(337,-337)	<i>Baulch 94</i>	
$H_2O_2+CH_2(S) \leftrightarrow CH_3O+OH$	3.0E13	0.	0.	(338,-338)	<i>Tsang 86</i>	
$H_2O_2+C_2H_3 \leftrightarrow C_2H_4+HO_2$	1.2E10	0.	-0.6E3	(339,-339)	<i>Tsang 86</i>	
$H_2O_2+O \leftrightarrow OH+HO_2$	6.6E11	0.	4.0E3	(340,-340)	<i>Baulch 94</i>	
$H_2O_2+OH \leftrightarrow H_2O+HO_2$	7.8E12	0.	1.3E3	(341,-341)	<i>Baulch 94</i>	

Réactions de CO2

CO2+CH2↔CH2O+CO	2.3E10	0.	0.	(342,-342)	<i>Tsang 86</i>
-----------------	--------	----	----	------------	-----------------

Réactions de CH3O2•

CH3O2↔CH2O+OH	1.5E13	0.	47.0E3	(343,-343)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+H↔CH3O+OH	9.6E13	0.	0.	(344,-344)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+H2↔CH3O2H+H	3.0E13	0.	26.0E3	(345,-345)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH2(S)↔CH2O+CH3O	1.8E13	0.	0.	(346,-346)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH2↔CH2O+CH3O	1.8E13	0.	0.	(347,-347)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH3↔CH3O+CH3O	5.0E12	0.	-1.4E3	(348,-348)	<i>Cavanagh 90</i>
CH3O2+CH4↔CH3O2H+CH3	1.8E11	0.	18.5E3	(349,-349)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+C2H↔CH3O+HCCO	2.4E13	0.	0.	(350,-350)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+C2H2↔CH3O2H+C2H	5.6E11	0.	24.5E3	(351,-351)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+C2H3↔CH3O+CH2CHO	2.4E13	0.	0.	(352,-352)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+C2H4↔CH3O+C2H4O	1.1E15	0.	20.0E3	(353,-353)	<i>Nikisha 81/ Moshkina 80 Nist</i>
CH3O2+C2H4↔CH3O2H+C2H3	3.9E12	0.	24.5E3	(354,-354)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+C2H5↔CH3O+C2H5O	2.4E13	0.	0.	(355,-355)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+C2H6↔CH3O2H+C2H5	2.9E11	0.	14.9E3	(356,-356)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+O↔CH3O+O2	3.6E13	0.	0.	(357,-357)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+OH↔CH3OH+O2	6.0E13	0.	0.	(358,-358)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+OH↔CH3O+HO2	3.0E12	0.	0.	(359,-359)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+CO↔CH3O+CO2	1.0E14	0.	24.0E3	(360,-360)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+HCO→CH3O+H+CO2	3.0E13	0.	0.	(361)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH2O↔CH3O2H+HCO	1.0E12	0.	12.1E3	(362,-362)	<i>Cavanagh 90</i>
CH3O2+CH3O↔CH2O+CH3O2H	3.0E11	0.	0.	(363,-363)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH2OH→CH3O+OH+CH2O	1.2E13	0.	0.	(364)	<i>Tsang 87</i>
CH3O2+CH3OH↔CH3O2H+CH2OH	1.8E12	0.	13.7E3	(365,-365)	<i>Tsang 87</i>
CH3O2+CH3OH↔CH3O2H+CH3O	2.8E11	0.	18.8E3	(366,-366)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+CH2CO↔CH3O2H+HCCO	1.7E12	0.	27.0E3	(367,-367)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+CH3CO→CH3+CO2+CH3O	2.4E13	0.	0.	(368)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH3CHO↔CH3O2H+CH3CO	1.0E12	0.	12.1E3	(369,-369)	<i>Cavanagh 90</i>
CH3O2+CH3CHO↔CH3O2H+CH2CHO	1.7E12	0.	19.2E3	(370,-370)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+C2H4O↔CH3O2H+CH2CHO	2.2E12	0.	16.0E3	(371,-371)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+HO2↔CH3O2H+O2	2.5E11	0.	-1.6E3	(372,-372)	<i>Baulch 94</i>
CH3O2+HO2→O2+CH2O+H2O	5.0E10	0.	0.	(373)	<i>Ranzi 94</i>
CH3O2+H2O2↔CH3O2H+HO2	2.4E12	0.	9.9E3	(374,-374)	<i>Tsang 86</i>
CH3O2+CH3O2→CH3OH+CH2O+O2	2.5E10	0.	-0.8E3	(375)	<i>Baulch 94(c)</i>
CH3O2+CH3O2→CH3O+CH3O+O2	2.5E10	0.	-0.8E3	(376)	<i>Baulch 94(c)</i>

Réactions de CH3O2H

CH3O2H↔CH3O+OH	6.0E14	0.	42.3E3	(377,-377)	<i>Baulch 94</i>
CH3O2H+O↔CH3O2+OH	2.0E13	0.	4.8E3	(378,-378)	<i>Baulch 94(a)</i>
CH3O2H+OH↔H2O+CH3O2	1.8E12	0.	-0.37E3	(379,-379)	<i>Baulch 94(a)</i>
CH3O2H+CH3O→CH3OH+OH+CH2O	1.5E11	0.	6.5E3	(380)	<i>Ranzi 94</i>

Réactions de C2H5O2•

C2H5O2↔C2H4O2H	4.2E12	0.	36.9E3	(381,-381)	<i>Hughes 93</i>
C2H5O2+H2↔C2H5O2H+H	7.9E12	0.	21.0E3	(382,-382)	<i>Ranzi 94</i>
C2H5O2+CH3↔C2H5O+CH3O	2.0E12	0.	-1.2E3	(383,-383)	<i>Ranzi 94</i>
C2H5O2+CH4↔C2H5O2H+CH3	3.9E12	0.	24.0E3	(384,-384)	<i>Ranzi 94</i>

$C_2H_5O_2 + C_2H_2 \leftrightarrow C_2H_5O_2H + C_2H$	5.6E11	0.	24.4E3	(385,-385)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + C_2H_4 \leftrightarrow C_2H_5O_2H + C_2H_3$	3.9E12	0.	24.4E3	(386,-386)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + C_2H_4 \leftrightarrow C_2H_5O + C_2H_4O$	2.3E16	0.	21.9E3	(387,-387)	Moshkina 80 Nist
$C_2H_5O_2 + C_2H_6 \leftrightarrow C_2H_5O_2H + C_2H_5$	5.1E12	0.	19.5E3	(388,-388)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + H_2O \leftrightarrow C_2H_5O_2H + OH$	5.6E12	0.	30.6E3	(389,-389)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CO \leftrightarrow CO_2 + C_2H_5O$	1.0E14	0.	24.0E3	(390,-390)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_2O \leftrightarrow C_2H_5O_2H + HCO$	4.5E12	0.	14.4E3	(391,-391)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3OH \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_3O$	2.8E11	0.	18.4E3	(392,-392)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3OH \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_2OH$	2.8E12	0.	19.5E3	(393,-393)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_2CO \leftrightarrow C_2H_5O_2H + HCCO$	1.7E12	0.	24.4E3	(394,-394)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3CHO \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_3CO$	3.9E12	0.	14.4E3	(395,-395)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3CHO \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_2CHO$	1.7E12	0.	19.5E3	(396,-396)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + C_2H_4O \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_2CHO$	2.2E12	0.	16.3E3	(397,-397)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + HO_2 \leftrightarrow O_2 + C_2H_5O_2H$	3.9E11	0.	-1.3E3	(398,-398)	Baulch 89
$C_2H_5O_2 + H_2O_2 \leftrightarrow C_2H_5O_2H + HO_2$	4.5E11	0.	10.8E3	(399,-399)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3O_2 \rightarrow C_2H_5O + CH_3O + O_2$	2.0E11	0.	0.	(400)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + CH_3O_2H \leftrightarrow C_2H_5O_2H + CH_3O_2$	1.1E12	0.	16.3E3	(401,-401)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2 + C_2H_5O_2 \rightarrow 2C_2H_5O + O_2$	4.1E10	0.	0.2E3	(402)	Lightfoot 92 (c)
$C_2H_5O_2 + C_2H_5O_2 \rightarrow C_2H_5OH + CH_3CHO + O_2$	1.8E10	0.	0.2E3	(403)	Lightfoot 92 (c)

Réactions de $\bullet C_2H_4O_2H$

$C_2H_4O_2H \leftrightarrow C_2H_4O + OH$	1.5E11	0.	20.0E3	(404,-404)	Ranzi 94
$C_2H_4O_2H \leftrightarrow CH_2OH + CH_2O$	2.5E13	0.	27.5E3	(405,-405)	Ranzi 94
$C_2H_4O_2H \leftrightarrow C_2H_4 + HO_2$	2.0E13	0.	23.5E3	(406,-406)	Ranzi 94

Réactions de $C_2H_5O_2H$

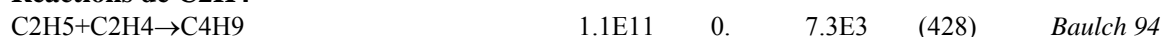
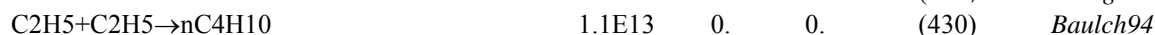
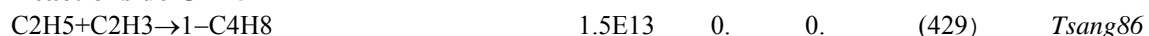
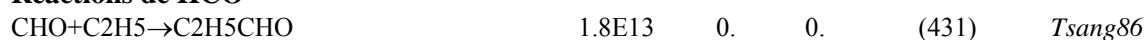
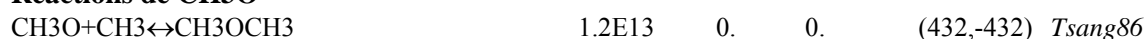
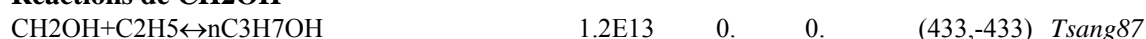
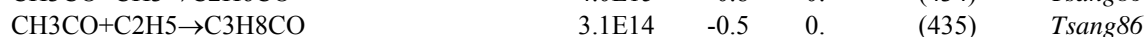
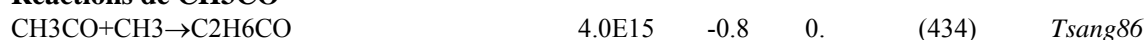
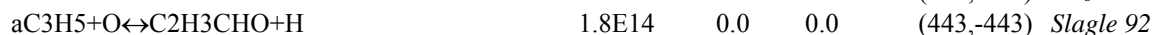
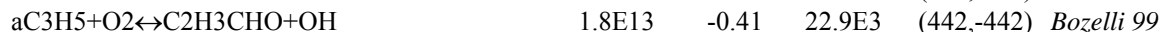
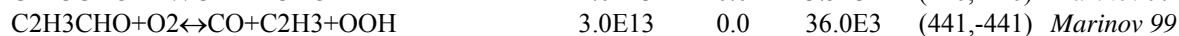
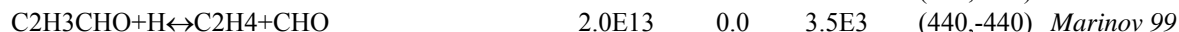
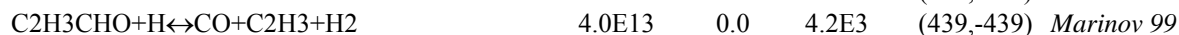
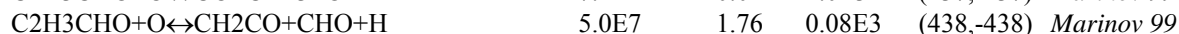
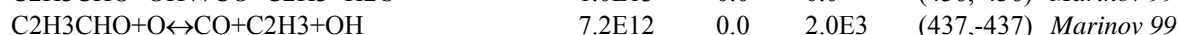
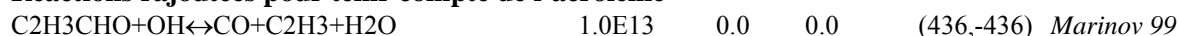
$C_2H_5O_2H \leftrightarrow C_2H_5O + OH$	4.0E15	0.	42.9E3	(407,-407)	Baulch 94
$C_2H_5O_2H + H \rightarrow CH_3CHO + OH + H_2$	3.2E13	0.	7.7E3	(408)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_3 \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_4$	5.7E11	0.	8.7E3	(409)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + C_2H \rightarrow CH_3CHO + OH + C_2H_2$	6.0E11	0.	9.2E3	(410)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + C_2H_3 \rightarrow CH_3CHO + OH + C_2H_4$	1.0E12	0.	8.7E3	(411)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + C_2H_5 \rightarrow CH_3CHO + OH + C_2H_6$	3.4E11	0.	11.4E3	(412)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + OH \rightarrow CH_3CHO + OH + H_2O$	5.9E12	0.	0.9E3	(413)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + HCO \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_2O$	1.8E12	0.	16.7E3	(414)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_3O \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_3OH$	6.3E11	0.	5.5E3	(415)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_2OH \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_3OH$	4.2E11	0.	13.6E3	(416)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_3CO \rightarrow 2CH_3CHO + OH$	2.0E12	0.	18.5E3	(417)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_2CHO \rightarrow 2CH_3CHO + OH$	3.4E11	0.	15.7E3	(418)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + HO_2 \rightarrow CH_3CHO + OH + H_2O_2$	8.0E11	0.	16.2E3	(419)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + CH_3O_2 \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_3O_2H$	1.1E12	0.	16.7E3	(420)	Ranzi 94
$C_2H_5O_2H + C_2H_5O_2 \rightarrow CH_3CHO + OH + C_2H_5O_2H$	1.1E12	0.	16.7E3	(421)	Ranzi 94

Réactions de $CH_3CO_3\bullet$

$CH_3CO_3 + C_2H_4O \leftrightarrow CH_3CO_3H + CH_2CHO$	1.0E12	0.	9.3E3	(422,-422)	Ranzi 94
$CH_3CO_3 + HO_2 \leftrightarrow CH_3CO_3H + O_2$	5.5E10	0.	-2.6E3	(423,-423)	Cavanagh 90
$CH_3CO_3 + C_2H_5O_2H \leftrightarrow CH_3CO_3H + C_2H_5O_2$	5.0E11	0.	9.2E3	(424,-424)	Ranzi 94
$CH_3CO_3 + C_2H_5O_2H \rightarrow CH_3CHO + OH + CH_3CO_3H$	5.0E11	0.	9.2E3	(425)	Ranzi 94
$CH_3CO_3 + CH_3CO_3 \rightarrow 2CH_3 + O_2 + 2CO_2$	1.7E12	0.	-1.0E3	(426)	Cavanagh 90

Réaction de CH_3CO_3H

$CH_3CO_3H \rightarrow CH_3 + CO_2 + OH$	1.0E16	0.	40.0E3	(427)	Cavanagh 90
--	--------	----	--------	-------	-------------

Réactions produisant des C2+ radicalaires**Réactions de C2H4****Réactions de C2H5****Réactions de HCO****Réactions de CH3O****Réactions de CH2OH****Réactions de CH3CO****Réactions rajoutées pour tenir compte de l'acroléine**

(a) Les produits formés sont supposés être ceux qui sont proposés.

(d) A haute température, on préfère n = 0.

(c) On considère le rapport moyen entre les différentes voies.

(d) On suppose que les radicaux •CH2CH2OH et CH3CH(•)OH se décomposent rapidement, respectivement en C2H4 + OH et en CH3CHO + H.

(e) La vitesse de la réaction de métathèse formant •CH2CH2OH est assimilée à celle formant •C2H5 à partir de l'éthane.

Références bibliographiques :

Aders W.K., Wagner H.G. - Ber. Bunsenges. Phys. Chem., 77, 712 (1973).

Atkinson R. - Int. J. Chem. Kinet., 18, 555 (1986).

Baldwin R.R., Keen A., Walker R.W. - J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1, 80, 435 (1984).

Baulch D.L., Cobos C.J., Cox R.A., Esser C., Frank P., Just Th., Kerr J.A., Pilling M.J., Troe J., Walker R.W., Warnatz J. - J. Phys. Chem. Ref. Data, 21, 411 (1992).

Baulch D.L., Cobos C.J., Cox R.A., Franck P., Hayman G.D., Just Th., Kerr J.A., Murrells T.P., Pilling M.J., Troe J., Walker R.W., Warnatz J. - Combust. Flame, 98, 59 (1994).

Bogan D.J., Hand C.W. - J. Phys. Chem., 82, 2067 (1978).

Bozelli J.W., Dean A.M. - J. Phys. Chem., 94, 3313 (1990).

Canosa-Mas C.E., Frey H.M., Walsh R. - J. Chem. Soc. Faraday Trans 2, 80, 561 (1984).

Cavanagh J., Cox R.A., Olson G. - Combust. Flame, 82, 15 (1990).

- Colket M.B., Naegeli D.W., Glassman I. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 7, 223 (1975).
- Dagaut P., Boettner J.C., Cathonnet M. - *Comb. Sci., Tech.*, 77, 127 (1991).
- Dean A.J., Davidson D.F., Hanson R.K. - *J. Phys. Chem.*, 95, 183 (1991).
- Dean A.M., Westmoreland P.R. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 19, 207 (1987).
- Duran R.P., Amorebieta V.T., Colussi A.J. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 21, 847 (1989).
- Fahr A., Stein S.E. - 22nd Symp. (Int.) Combust., p 1023 (1988).
- Frank P., Bhaskaren K.A., Just Th. - *J. Phys. Chem.*, 90, 2226 (1986).
- Gill R.J., Johnson W.D., Atkinson G.H. - *Chem. Phys.*, 58, 29 (1981).
- Glarborg P., Kee R. J., Miller J. A. - *Combust. Flame*, 65, 177 (1986).
- Gray P., Herod A.A. - *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1*, 64, 1568 (1968).
- Grotheer H.H., Just Th. - *Chem. Phys. Lett.*, 78, 71 (1981).
- Heicklen J. - *Advances in photochem.*, 14, 177 (1988).
- Hidaka Y., Oki T., Kawano H. - *J. Phys. Chem.*, 93, 7134 (1989).
- Hohlein G., Freeman G.R. - *J. Am. Chem. Soc.*, 92, 6118 (1970).
- Hughes K.J., Pereira A.R., Pilling M.J. - Final report of the CEC contract CHEMCOM-JOUE-0036 C (1993).
- Lesclaux R., Roussel P., Veyret B., Pouchan C. - *J. Am. Chem. Soc.*, 108, 3872 (1986).
- Lightfoot P.D., Cox R.A., Crowley J.N., Destriau M., Hayman G.D., Jenkin M.E., Moortgat G.K., Zabel F. - *Atmos. Environ.*, 26A, 10, 1805 (1992).
- Lifshitz A., Ben-Hamou H. - *J. Phys. Chem.*, 87, 1782 (1986).
- Mahmud K., Marshall P., Fontijn A. - *J. Phys. Chem.*, 91, 1568 (1987).
- Moshkina R.I., Polyak S.S., Sokolova N.A., Masterovoi I.F., Nalbandyan A.B. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 12, 315 (1980).
- Murrell J.N., Rodriguez J.A. - *J. Molec. Struct. (Theochem.)*, 139, 267(1986).
- Nikisha L.V., Moshkina R.I., Polyak S.S., Vedenev V.I. - *Kinet. Cata.*, 22, 1104 (1981).
- NIST Standard Reference Database 17, NIST Chemical Kinetics, version 5 (1993).
- Ranzi E., Sogaro A., Gaffuri P., Pennati G., Faravelli T. - *Comb. Sci. Tech.*, 96, 279 (1994).
- Scherzer K., Loser U., Stiller W. - *Z. Chem.*, 27, 300 (1987).
- Schuchmann H.-P., Laidler K.J. - *Can. J. Chem.*, 48, 2315 (1970).
- Schulz G., Klotz H.-D., Spangenberg H.-J. - *Z. Chem.*, 25, 88 (1985).
- Tsang W., R.F. Hampson - *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 15, n°3 (1986).
- Tsang W. - *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 16, n°3 (1987).
- Tsuboi T., Hashimoto K. - *Combust. Flame*, 42, 61 (1981).
- Vandooren J., Van Tiggelen P.J. - 22th Symp. (Int.) Combust., p 1133 (1976).
- Wagner A.F., Slagle I.R., Sarzynski D., Gutman D. - *J. Phys. Chem.*, 94, 1853 (1990).
- Warnatz J. - *Combustion Chemistry*, Chap. 5, (Gardiner W.C. Ed.), Springer Verlag, New York (1984).

ANNEXE II-B

BASE DE REACTIONS DES ESPECES INSATUREES C₃-C₆

La base de réactions des espèces insaturées C₃ - C₆ (Fournet *et al.*, 1998) fait réagir les espèces contenant trois à six atomes de carbone. Elle permet notamment d'écrire les réactions de consommation de l'allène et du propyne ainsi que les réactions de formation et de consommation du benzène.

Les références bibliographiques auxquelles renvoient les noms en italique sont données à la suite du tableau des réactions. Les réactions signalées par (*) sont celles dont les paramètres cinétiques ont été estimés par analogie avec des valeurs de la littérature. Les constantes de vitesse $k = A.T^b \cdot \exp(-E_a/RT)$ sont exprimées dans le système d'unités cm³, mol, s, cal.

BASE DE REACTIONS C₃-C₆

Réactions	A	b	E _a	n°	références
REACTIONS DES ESPECES NON OXYGENEES EN C3					
Réactions de C3H2 (CH≡CCH••)					
CH+C2H2 ↔ C3H2+H	2.1E14	0.0	-0.5E3	(1,-1)	<i>Miller 92</i>
C3H2+O ↔ C2H+H+CO	3.0E13	0.0	0.0	(2,-2)	<i>Peeters 96</i>
C3H2+OH ↔ C2H2+CHO	5.0E13	0.0	0.0	(3,-3)	<i>Miller 92</i>
C3H2+O2 ↔ CHCO+CO+H	5.0E13	0.0	0.0	(4,-4)	<i>Miller 92</i>
Réactions de C3H3 (CH≡CCH2•, propargyle stabilisé par résonance)					
CH2(S)+C2H2 ↔ C3H3+H	1.8E14	0.0	0.0	(5,-5)	<i>Miller 87, Baulch 94</i>
C3H3+H ↔ C3H2+H2	2.0E13	0.0	0.0	(6,-6)	<i>Miller 92, Braun 89</i>
C3H3+O ↔ C2H+HCHO	1.4E14	0.0	0.0	(7,-7)	<i>Miller 92, Slagle 91</i>
C3H3+OH ↔ C3H2+H2O	2.0E13	0.0	0.0	(8,-8)	<i>Miller 92</i>
C3H3+OH ↔ C2H3+CHO	4.0E13	0.0	0.0	(9,-9)	<i>Wang 97</i>
C2H2+CHCO ↔ C3H3+CO	1.0E11	0.0	3.0E3	(10,-10)	<i>Miller 92</i>
C3H3+O2 ↔ CH2CO+CHO	3.0E10	0.0	2.9E3	(11,-11)	<i>Miller 92, Slagle 88</i>
C3H3+C2H3 → C5H5# + H	9.6E40	-7.8	28.8E3	(11bis)	<i>Marinov 97</i>
Réactions de pC3H4 (CH≡CCH3, propyne)					
pC3H4 → aC3H4	2.1E12	0.0	60.0E3	(12)	<i>Hidaka 89</i>
pC3H4+M ↔ C3H3+H+M	4.7E18	0.0	80.0E3	(13,-13)	<i>Hidaka 89</i>
C2H2+CH2(T) ↔ pC3H4	3.5E12	0.0	0.0	(14,-14)	<i>Tsang 86</i>
pC3H4 ↔ C2H+CH3	4.2E16	0.0	100.0E3	(15,-15)	<i>Wu 87</i>
C2H2+CH3 ↔ pC3H4+H	6.7E19	-2.08	31.6E3	(16,-16)	<i>Dean 87</i>
pC3H4+H ↔ tC3H5	6.5E12	0.0	1.7E3	(17,-17)	<i>Wagner 72</i>
pC3H4+H ↔ sC3H5	5.8E12	0.0	3.1E3	(18,-18)	<i>Wagner 72</i>
pC3H4+H ↔ C3H3+H2	1.7E5	2.5	2.5E3	(19,-19)	<i>Tsang 91 (*)</i>
pC3H4+CH3 ↔ C3H3+CH4	2.2E0	3.5	5.7E3	(20,-20)	<i>Tsang 91 (*)</i>
pC3H4+C2H ↔ C3H3+C2H2	3.6E12	0.0	0.0	(21,-21)	<i>Tsang 91 (*)</i>
pC3H4+C2H3 ↔ C3H3+C2H4	2.2E0	3.5	4.7E3	(22,-22)	<i>Tsang 91 (*)</i>

$pC_3H_4 + C_2H_5 \leftrightarrow C_3H_3 + C_2H_6$	2.2E0	3.5	6.6E3	(23,-23)	<i>Tsang 91 (*)</i>
$pC_3H_4 + O \leftrightarrow CHCO + CH_3$	1.5E13	0.0	2.1E3	(24,-24)	<i>Warnatz 84</i>
$pC_3H_4 + O \leftrightarrow OH + C_3H_3$	6.0E10	0.7	7.6E3	(25,-25)	<i>Tsang 91 (*)</i>
$pC_3H_4 + OH \leftrightarrow CH_2CO + CH_3$	4.3E11	0.0	-0.8E3	(26,-26)	<i>Boodaghians 87</i>
$pC_3H_4 + OH \leftrightarrow C_3H_3 + H_2O$	3.1E6	2.0	-0.3E3	(27,-27)	<i>Tsang 91 (*)</i>
$pC_3H_4 + O_2 \leftrightarrow C_3H_3 + HO_2$	5.0E12	0.0	51.0E3	(28,-28)	<i>Dagaut 90</i>
$pC_3H_4 + HO_2 \leftrightarrow C_2H_4 + CO + OH$	6.0E9	0.0	8.0E3	(29,-29)	<i>Tsang 86 (*)</i>
$pC_3H_4 + HO_2 \leftrightarrow C_3H_3 + H_2O_2$	9.6E3	2.6	13.9E3	(30,-30)	<i>Tsang 91 (*)</i>

Réactions de aC3H4 (CH₂=C=CH₂, allène)

$aC_3H_4 \rightarrow pC_3H_4$	2.5E12	0.0	59.0E3	(31)	<i>Hidaka 89</i>
$aC_3H_4 + M \leftrightarrow C_3H_3 + H + M$	2.0E18	0.0	80.0E3	(32,-32)	<i>Hidaka 89</i>
$C_2H_4 + CH \leftrightarrow aC_3H_4 + H$	1.3E14	0.0	-0.3E3	(33,-33)	<i>Baulch 94</i>
$C_2H_3 + CH_2(T) \leftrightarrow aC_3H_4 + H$	3.0E13	0.0	0.0	(34,-34)	<i>Miller 92</i>
$aC_3H_4 + H \leftrightarrow aC_3H_5$	4.0E12	0.0	2.7E3	(35,-35)	<i>Wagner 72</i>
$aC_3H_4 + H \leftrightarrow tC_3H_5$	8.5E13	0.0	2.0E3	(36,-36)	<i>Wagner 72</i>
$iC_4H_3 + CH_2(T) \leftrightarrow aC_3H_4 + C_2H$	2.0E13	0.0	0.0	(37,-37)	<i>Miller 92</i>
$aC_3H_4 + O \leftrightarrow C_2H_4 + CO$	7.8E12	0.0	1.6E3	(38,-38)	<i>Herbrechtmeier 72</i>
$aC_3H_4 + OH \leftrightarrow CH_2CO + CH_3$	2.0E12	0.0	-0.2E3	(39,-39)	<i>Liu 88</i>
$aC_3H_4 + OH \leftrightarrow HCHO + C_2H_3$	2.0E12	0.0	-0.2E3	(40,-40)	<i>Liu 88</i>
$aC_3H_4 + O_2 \leftrightarrow C_3H_3 + HO_2$	4.0E13	0.0	61.5E3	(41,-41)	<i>Dagaut 90</i>

Réactions de aC3H5 (CH₂=CHCH₂•, allyle stabilisé par résonance)

$aC_3H_5 + H \leftrightarrow C_3H_6$	2.0E13	0.0	0.0	(42,-42)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + CH_3 \leftrightarrow aC_3H_4 + CH_4$	3.0E12	-0.32	-0.1E3	(43,-43)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + CH_3 \leftrightarrow C_4H_8$	1.0E14	-0.32	-0.1E3	(44,-44)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + C_2H_3 \leftrightarrow aC_3H_4 + C_2H_4$	2.4E12	0.0	0.0	(45,-45)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + C_2H_5 \leftrightarrow aC_3H_4 + C_2H_6$	9.6E11	0.0	-0.1E3	(46,-46)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + O \leftrightarrow C_2H_3 + HCHO$	1.8E14	0.0	0.0	(47,-47)	<i>Slagle 90, Leung 95</i>
$aC_3H_5 + O_2 \leftrightarrow aC_3H_4 + HO_2$	5.0E15	-1.4	22.4E3	(48,-48)	<i>Bozelli, 93</i>
$aC_3H_5 + O_2 \leftrightarrow C_3H_5OO$	1.2E10	0.0	-2.3E3	(49,-49)	<i>Heyberger 2002</i>
$C_3H_5OO \rightarrow CH_2CHO + HCHO$	1.7E09	1.0	26.4E3	(50,-50)	<i>Heyberger 2002</i>
$aC_3H_5 + OH \leftrightarrow HCHO + C_2H_4$	1.5E13	0.0	0.0	(51,-51)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + HO_2 \rightarrow OH + C_2H_3CHO + H$	1.0E15	-0.8	0.0	(52,-52)	<i>Heyberger 2002</i>
$aC_3H_5 + C_3H_3 \leftrightarrow C_6H_6\# + 2H$	5.6E20	-2.54	1.7E3	(53,-53)	<i>Marinov 97</i>
$aC_3H_5 + aC_3H_5 \leftrightarrow aC_3H_4 + C_3H_6$	8.4E10	0.0	-0.3E3	(54,-54)	<i>Tsang 91</i>
$aC_3H_5 + aC_3H_5 \leftrightarrow C_6H_{10}$	1.2E13	0.0	0.0	(55,-55)	<i>Baulch 94</i>
$aC_3H_5 + C_2H_2 \rightarrow C_5H_6\# + H$	2.9E32	-5.83	25.7E3	(56,-56)	<i>Marinov 97</i>
$aC_3H_5 + C_2H_3 \leftrightarrow C_5H_6\# + 2H$	1.6E35	-14.0	61.2E3	(57)	<i>Marinov 97</i>

Réactions de sC3H5 (•CH=CHCH₃, 2-méthyl vinyle)

$sC_3H_5 \leftrightarrow aC_3H_5$	5.0E13	0.0	37.0E3	(58,-58)	<i>Weissman 89</i>
$CH_3 + C_2H_2 \leftrightarrow sC_3H_5$	6.0E11	0.0	7.7E3	(59,-59)	<i>Baulch 94</i>
$sC_3H_5 + H \leftrightarrow C_3H_6$	1.0E14	0.0	0.0	(60,-60)	<i>Touchard2005</i>

Réactions de tC3H5 (•C(CH₃)↔CH₂, 1-méthyl vinyle)

$tC_3H_5 + H \leftrightarrow C_3H_6$	1.0E14	0.0	0.0	(61,-61)	<i>Touchard2005</i>
$tC_3H_5 + H \leftrightarrow aC_3H_4 + H_2$	3.3E12	0.0	0.0	(62,-62)	<i>Dagaut 90</i>
$tC_3H_5 + CH_3 \leftrightarrow aC_3H_4 + CH_4$	1.0E11	0.0	0.0	(63,-63)	<i>Dagaut 90</i>
$tC_3H_5 + C_2H_3 \leftrightarrow aC_3H_4 + C_2H_4$	1.0E12	0.0	0.0	(64,-64)	<i>Leung 95</i>
$tC_3H_5 + C_2H_5 \leftrightarrow aC_3H_4 + C_2H_6$	1.0E12	0.0	0.0	(65,-65)	<i>Leung 95</i>
$tC_3H_5 + O \leftrightarrow CH_2CO + CH_3$	1.8E14	0.0	0.0	(66,-66)	<i>Leung 95</i>
$tC_3H_5 + O_2 \leftrightarrow CH_3 + CO + HCHO$	4.3E12	0.0	0.0	(67,-67)	<i>Dagaut 90</i>
$tC_3H_5 \leftrightarrow aC_3H_5$	2.0E13	0.0	47.0E3	(68,-68)	<i>Weissman 89</i>

Réactions de C3H6 (CH2=CHCH3, propène)

C2H4+CH2(S) ↔ C3H6	9.6E13	0.0	0.0	(69,-69)	Baulch 94
C2H4+CH2(T) ↔ C3H6	3.2E12	0.0	5.1E3	(70,-62)	Baulch 94
C2H3+CH3 ↔ C3H6	2.5E13	0.0	0.0	(71,-63)	Tsang 86
C2H4+CH3 ↔ C3H6+H	6.6E11	0.0	15.9E3	(72,-64)	Tsang 86
C2H5+CH2(S) ↔ C3H6+H	9.0E12	0.0	0.0	(73,-65)	Tsang 86
C2H6+CH ↔ C3H6+H	1.1E14	0.0	-0.3E3	(74,-66)	Baulch 94
C3H6+H ↔ sC3H5+H2	4.6E5	2.5	9.8E3	(75,-67)	Tsang 91
C3H6+H ↔ tC3H5+H2	8.0E5	2.5	12.3E3	(76,-68)	Tsang 91
C3H6+H ↔ aC3H5+H2	1.7E5	2.5	2.5E3	(77,-69)	Tsang 91
C3H6+CH3 ↔ aC3H5+CH4	2.2E0	3.5	5.7E3	(78,-70)	Tsang 91
C3H6+CH3 ↔ sC3H5+CH4	8.4E-1	3.5	11.7E3	(79,-71)	Tsang 91
C3H6+CH3 ↔ tC3H5+CH4	1.3E0	3.5	12.9E3	(80,-72)	Tsang 91
C3H6+C2H5 ↔ aC3H5+C2H6	2.2E0	3.5	6.6E3	(81,-73)	Tsang 91
C3H6+O ↔ H+CH3+CH2CO	3.6E6	2.15	-0.8E3	(82,-74)	Tsang 91
C3H6+O ↔ aC3H5+OH	1.7E11	0.7	5.9E3	(75,-75)	Tsang 91
C3H6+OH ↔ HCHO+C2H5	2.9E12	0.0	-0.9E3	(76,-76)	Tsang 91
C3H6+OH ↔ aC3H5+H2O	3.1E6	2.0	-0.3E3	(77,-77)	Tsang 91
C3H6+OH ↔ sC3H5+H2O	1.1E6	2.0	1.45E3	(78,-78)	Tsang 91
C3H6+OH ↔ tC3H5+H2O	2.1E6	2.0	2.8E3	(79,-79)	Tsang 91
C3H6+O2 ↔ aC3H5+HO2	1.9E12	0.0	39.0E3	(80,-80)	Walker 93
C3H6+HO2 ↔ aC3H5+H2O2	9.6E3	2.6	13.9E3	(81,-81)	Tsang 91
C3H6+CH3 ↔ nC4H9-2	1.7E11	0.0	7.4E3	(82,-82)	Touchard2005
nC4H9-2+O2 → C4H8+HO2	1.6E12	0.0	5.0E3	(83)	Touchard2005
nC4H9-2+H → C4H10	1.0E14	0.0	0.0E3	(84)	Touchard2005
nC4H9-2 → H+C4H8	3.0E13	0.0	39.0E3	(85)	Touchard2005
nC4H9-2 → H+C4H8	2.0E13	0.0	38.0E3	(86)	Touchard2005

Réactions de nC3H7 (•CH2CH2CH3, 1-propyle)

nC3H7 ↔ CH3+C2H4	2.0E+13	0.0	31.0E3	(87,-87)	Touchard2005
nC3H7 ↔ H+C3H6	3.0E+13	0.0	38.0E3	(88,-88)	Touchard2005
nC3H7 ↔ iC3H7	1.96E+10	1.0	38.6E3	(89,-89)	Touchard2005
nC3H7+O2 ↔ HO2+C3H6	1.6E+12	0.0	5.0E3	(90,-90)	Touchard2005

Réactions de iC3H7 (CH3CH•CH3, iso-propyle)

iC3H7+O2 ↔ HO2+C3H6	1.4E+12	0.0	5.0E3	(91,-91)	Touchard2005
iC3H7 ↔ H+C3H6	6.0E+13	0.0	39.0E3	(92,-92)	Touchard2005

REACTIONS DES ESPECES NON OXYGENEES EN C4**Réactions de C4H8-1 (CH2=CHCH2CH3, 1-butène)**

C4H8-1+H ↔ aC4H7+H2	5.4E4	2.5	-1.9E3	(93,-93)	Heyberger 2002
C4H8-1+OH ↔ aC4H7+H2O	3.0E6	2.0	-1.52E3	(94,-94)	Heyberger 2002
C4H8-1+CH3 ↔ aC4H7+CH4	1.0E11	0.0	7.3E3	(95,-95)	Heyberger 2002
C4H8-1+O ↔ aC4H7+OH	8.8E10	0.7	3.25E3	(96,-96)	Heyberger 2002
C4H8-1+H ↔ C2H4+C2H5	1.32E13	0.0	1.56E3	(97,-97)	Exgas
C4H8-1+H ↔ CH3+C3H6	1.32E13	0.0	3.26E3	(98,-98)	Exgas
C4H8-1+OH ↔ HCHO+CH3+C2H4	1.4E12	0.0	-1.0E3	(99,-99)	Heyberger 2002
C4H8-1+OH ↔ CH3+C2H5CHO	1.4E12	0.0	-1.0E3	(100,-100)	Heyberger 2002
C4H8-1+O → CH3CO+C2H5	6.0D+04	2.560	-1.1E3	(101,-101)	Touchard 2005
C4H8-1+O → CHO+nC3H7	6.0D+04	2.560	-1.1E3	(102,-102)	Touchard 2005
C4H8-1+O → HCHO+C3H6	6.0D+04	2.560	-1.1E3	(103,-103)	Touchard 2005

Réactions de tC4H7 (CH₂=C•CH₂CH₃)

tC4H7+H↔C4H8-1	1.0E14	0.0	0.0	(104,-104)	<i>Exgas</i>
tC4H7+HO ₂ ↔OH+CH ₂ CO+C ₂ H ₅	1.0E15	-0.8	0.0	(105,-105)	<i>Heyberger 2002</i>
tC4H7+O ₂ →HCHO+B ₂ CO+C ₂ H ₅	4.6E+16	-1.39	0.1E3	(106,-106)	<i>Exgas</i>

Réactions de aC4H7 (CH₂=CHCH•CH₃, stabilisé par résonance)

aC4H7+H↔C4H8-1	1.0E14	0.0	0.0	(107,-107)	<i>estimation</i>
aC4H7+HO ₂ ↔OH+C ₂ H ₃ CHO+CH ₃	1.0E15	-0.8	0.0	(108,-108)	<i>Touchard 2005</i>
aC4H7+CH ₃ →C ₅ H ₁₀	2.0E13	0.0	0.0	(109)	<i>Touchard 2005</i>
aC4H7+aC ₃ H ₅ →C ₇ H ₁₂	1.0E13	0.0	0.0	(110)	<i>Touchard 2005</i>
aC4H7+iC ₄ H ₇ →C ₈ H ₁₄	2.0E13	0.0	0.0	(111)	<i>Touchard 2005</i>

Réactions du iC4H8 (CH₂=CH(/CH₃)CH₃, stabilisé par résonance)

iC4H8+C ₂ H ₄ →C ₆ H ₁₂	3.2E03	2.2	34.1E3	(112)	<i>Exgas</i>
iC4H8+C ₃ H ₆ →C ₇ H ₁₄	1.3E02	2.5	36.7E3	(113)	<i>Exgas</i>
iC4H8+C ₃ H ₆ →C ₇ H ₁₄	1.7E03	2.1	36.0E3	(114)	<i>Exgas</i>
tC ₃ H ₅ +CH ₃ ↔iC ₄ H ₈	4.3E12	0.0	0.0	(115,-115)	<i>Kingas</i>
iC4H8+H↔iC4H9	1.3E13	0.0	1560.0	(116,-116)	<i>Exgas</i>
iC4H8+H↔iC4H9	1.2E11	0.69	3000.0	(117,-117)	<i>Exgas</i>
iC4H8+O↔2CH ₃ +CH ₂ CO	6.0E4	2.56	-1130.0	(118,-118)	<i>Exgas</i>
iC4H8+O↔CHO+iC ₃ H ₇	6.0E4	2.56	-1130.0	(119,-119)	<i>Exgas</i>
iC4H8+O↔HCHO+C ₃ H ₆	6.0E4	2.56	-1130.0	(120,-120)	<i>Exgas</i>
iC4H8+OH↔CH ₃ +C ₂ H ₆ CO	1.4E12	0.0	-1040.0	(121,-121)	<i>Exgas</i>
iC4H8+OH↔iC ₃ H ₇ +HCHO	1.4E12	0.0	-1040.0	(122,-122)	<i>Exgas</i>
iC4H8+HO ₂ →OH+C ₄ H ₈ O#3	8.00E11	0.0	12860	(123)	<i>Exgas</i>
iC4H8+H→iC4H7+H ₂	3.5E5	2.5	2.51E3	(124)	<i>Exgas</i>
iC4H8+OH→iC4H7+H ₂ O	6.0E06	2.0	-298.0	(125)	<i>Exgas</i>
iC4H8+O→iC4H7+OH	3.5E11	0.7	59.0E3	(126)	<i>Exgas</i>
iC4H8+CH ₃ →iC4H7+CH ₄	4.4	3.5	56.7E3	(127)	<i>Exgas</i>

Réactions du iC4H7 (CH₂=CH(/CH₃)CH₂•, stabilisé par résonance)

iC4H7+H↔iC4H8	1.0E14	0.0	0.0	(128,-128)	<i>Exgas</i>
iC4H7+HO ₂ ↔OH+HCHO+tC ₃ H ₅	1.0E15	-0.8	0.0	(129,-129)	<i>Heyberger 2002</i>
iC4H7+CH ₃ →C ₅ H ₁₀	1.0E14	-0.32	-0.1E3	(130)	<i>Heyberger 2002</i>
iC4H7+aC ₃ H ₅ →C ₇ H ₁₂	1.0E13	0.0	0.0	(131)	<i>Touchard 2005</i>

Réactions de C4H2 (CH≡CC≡CH, diacétylène)

C ₂ H+C ₂ H↔C ₄ H ₂	1.8E13	0.0	0.0	(132,-132)	<i>Tsang 86</i>
2 C ₂ H ₂ ↔C ₄ H ₂ +H ₂	1.5E13	0.0	42.7E3	(133,-133)	<i>Leung 95</i>
C ₂ H ₂ +C ₂ H→C ₄ H ₂ +H	9.0E13	0.0	0.0	(135)	<i>Baulch 94</i>
C ₄ H ₂ +H→C ₂ H ₂ +C ₂ H	6.0E14	0.0	15.4E3	(136)	<i>Colket 86</i>
C ₄ H ₂ +O↔C ₃ H ₂ +CO	2.7E13	0.0	1.72E3	(137,-137)	<i>Warnatz 84</i>
C ₄ H ₂ +OH↔CHO+C ₃ H ₂	6.7E12	0.0	-0.4E3	(138,-138)	<i>Leeds (web)</i>

Réactions de nC4H3 (CH≡CCH↔CH•)

nC ₄ H ₃ (+M)↔C ₄ H ₂ +H (+M) k _∞	1.0E14	0.0	36.0E3	(139,-139)	<i>Miller 92</i>
ko	1.0E14	0.0	30E3		
Coefficients de Troe /1.0 1.0 1.0E8/ O ₂ /0.4/ B ₂ CO/0.75/ CO ₂ /1.5/ H ₂ O/6.5/N ₂ /4/AR/0.35/ HE/0.35/ C ₆ H ₆ #/3.0/toluene/3.0/					
C ₃ H ₃ +CH↔nC ₄ H ₃ +H	7.0E13	0.0	0.0	(140,-140)	<i>Miller 92</i>
nC ₄ H ₃ +H↔iC ₄ H ₃ +H	1.0E14	0.0	0.0	(141,-141)	<i>Miller 92</i>
nC ₄ H ₃ +H↔C ₄ H ₂ +H ₂	5.0E13	0.0	0.0	(142,-142)	<i>Miller 92 (*)</i>
2C ₂ H ₂ ↔nC ₄ H ₃ +H	1.0E12	0.0	64.1E3	(143,-143)	<i>Leung 95</i>
C ₂ H+C ₂ H ₃ ↔nC ₄ H ₃ +H	1.8E13	0.0	0.0	(144,-144)	<i>Tsang 86</i>
nC ₄ H ₃ +OH↔C ₄ H ₂ +H ₂ O	3.0E13	0.0	0.0	(145,-145)	<i>Miller 92 (*)</i>

Réactions de iC4H3 (CH≡C•C=CH2)

iC4H3 ↔ nC4H3	1.5E13	0.0	67.8E3	(146,-146)	Leung 95
iC4H3 (+M) ↔ C4H2+H (+M)	k∞ 1.0E14	0.0	55.0E3	(147,-147)	Miller 92
	ko 2.0E15	0.0	48E3		
Coefficients de Troe	1.0	1.0	1.0E8		
O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ N2/.4/AR/0.35/ HE/0.35/C6H6#/3.0/toluene/3.0/					
C3H2+CH2(T)↔ iC4H3+H	1.2E14	0.0	0.8E3	(148,-148)	Baulch 94 (*)
2C2H2 ↔ iC4H3+H	2.0E12	0.0	66.1E3	(149,-149)	Leung 95
C3H3+CH ↔ iC4H3+H	7.0E13	0.0	0.0	(150,-150)	Miller 92
iC4H3+H ↔ C4H2+H2	5.0E13	0.0	0.0	(151,-151)	Miller 92
iC4H3+O ↔ CH2CO+C2H	2.0E13	0.0	0.0	(152,-152)	Miller 92
iC4H3+OH ↔ C4H2+H2O	3.0E13	0.0	0.0	(153,-153)	Miller 92
iC4H3+O2 ↔ CH2CO+CHCO	1.0E12	0.0	0.0	(154,-154)	Miller 92

Réactions de C4H4 (CH≡CCH=CH2, vinylacétylène)

C3H3+CH2(T)↔ C4H4+H	4.0E13	0.0	0.0	(155,-155)	Miller 92
C2H3+C2H2 → C4H4+H	2.0E13	0.0	25.1E3	(156)	Douté 95
C4H4+H → C2H3+C2H2	2.0E13	0.0	12.4E3	(157)	Douté 95
C2H4+C2H → C4H4+H	1.2E13	0.0	0.0	(158)	Tsang 86
C4H4+H → iC4H3+H2	3.1E14	0.0	14.5E3	(159)	Colket 86
iC4H3+H2 → C4H4+H	4.2E12	0.0	21.9E3	(160)	Colket 86
C4H4+H → nC4H3+H2	8.0E13	0.0	14.5E3	(161)	Colket 86
nC4H3+H2 → C4H4+H	2.8E12	0.0	11.2E3	(162)	Colket 86
C2H+C4H4 → C2H2+iC4H3	4.0E13	0.0	0.0	(163)	Colket 86
C2H2+iC4H3 → C2H+C4H4	3.0E13	0.0	27.9E3	(164)	Colket 86
C2H3+C4H4 → C2H4+nC4H3	5.0E11	0.0	16.3E3	(165)	Colket 86
nC4H3+C2H4 → C2H3+C4H4	3.5E11	0.0	13.4E3	(166)	Colket 86
C2H3+C4H4 → C2H4+iC4H3	5.0E11	0.0	16.3E3	(167)	Colket 86
iC4H3+C2H4 → C2H3+C4H4	1.3E11	0.0	24.1E3	(168)	Colket 86
aC3H4+aC3H4 ↔ C2H4+C4H4	1.0E15	0.0	48.0E3	(169,-169)	Hidaka 89
C4H4+O ↔ aC3H4+CO	3.0E13	0.0	1.8E3	(170,-170)	Leung 95
C4H4+OH ↔ nC4H3+H2O	7.5E6	2.0	5.0E3	(171,-171)	Miller 92
C4H4+OH ↔ iC4H3+H2O	1.0E7	2.0	2.0E3	(172,-172)	Miller 92

Réactions de tC4H4 (CH2=C=C=CH2, vinyléthylène)

tC4H4+OH ↔ iC4H3+H2O	2.0E7	2.0	2.0E3	(173,-173)	Marinov 97
tC4H4+H ↔ iC4H3+H2	3.0E7	2.0	6.0E3	(174,-174)	Marinov 97

Réactions de nC4H5 (CH2=CHCH=CH•)

nC4H5 (+M) ↔ H+C4H4 (+M)	k∞ 1.0E14	0.0	37.0E3	(175,-175)	Miller 92
	ko 1.0E14	0.0	30.0E3		
O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ N2/.4/AR/0.35/ HE/0.35/C6H6#/3.0/toluene/3.0/					
nC4H5+H ↔ C4H4+H2	1.5E13	0.0	0.0	(176,-176)	Wang 97
nC4H5+H ↔ iC4H5+H	1.0E14	0.0	0.0	(177,-177)	Miller 92
nC4H5 ↔ C2H2+C2H3	1.0E14	0.0	43.9E3	(178,-178)	Hidaka 96
nC4H5+OH ↔ C4H4+H2O	2.5E12	0.0	0.0	(179,-179)	Wang 97
nC4H5+O2 ↔ C2H4+CO+CHO	4.2E10	0.0	2.5E3	(180,-180)	Wang 97
nC4H5+O2 ↔ C4H4+HO2	1.0E12	0.0	0.0	(181,-181)	Westbrook 82 (*)

Réactions de iC4H5 (CH₂=CH•C=CH₂, stabilisé par résonance)

iC4H5 ↔ nC4H5	2.0E13	0.0	53.5E3	(182,-182)	<i>Klotz 98</i>
iC4H5 (+M) ↔ H+C4H4 (+M)	k _∞ 1.0E14	0.0	50.0E3	(183,-183)	<i>Miller 92</i>
	k ₀ 2.0E15	0.0	42000		
	O2/0.4/ CO/0.75/ CO2/1.5/ H2O/6.5/ N2/.4/AR/0.35/ HE/0.35/ C6H6#/3.0/toluene/3.0/				
iC4H5+H ↔ C4H4+H2	3.0E13	0.0	0.0	(184,-184)	<i>Wang 97</i>
2C2H3 ↔ iC4H5+H	1.2E22	-2.44	13.7E3	(185,-185)	<i>Wang 97</i>
iC4H5+OH ↔ C4H4+H2O	5.50E12	0.0	0.0	(186,-186)	<i>Wang 97</i>
iC4H5+O2 ↔ C4H4+HO2	1.0E12	0.0	3.0E3	(187,-187)	<i>Westbrook 82 (*)</i>

Réactions de C4H5-1s (CH₃CH•C≡CH, stabilisé par résonance)

C4H5-1s→H+C4H4	6.0E13	0.0	50.4E3	(188)	<i>Hidaka96</i>
----------------	--------	-----	--------	-------	-----------------

Les réactions suivantes sont déduites de celles de C3H3

C4H5-1s+H↔C4H4+H2	2.0E13	0.0	0.0	(189,-189)	<i>Miller92/Braun89</i>
C4H5-1s+O↔C2H+CH3CHO	1.4E14	0.0	0.0	(190,-190)	<i>Miller 92/Slagle91</i>
C4H5-1s+OH↔C4H4+H2O	2.0E13	0.0	0.0	(191,-191)	<i>Miller 92</i>
C4H5-1s+OH↔CHO+sC3H5	4.0E13	0.0	0.0	(192,-192)	<i>Wang 97</i>
C4H5-1s+O2↔CHO+CO+C2H4	3.0E10	0.0	2.9E3	(193,-193)	<i>Miller 92/Slagle88</i>

REACTIONS DE C4H5-1p (•CH₂CH₂C≡CH)

C4H5-1p→H+C4H4	4.0E13	0.0	38.8E3	(194)	<i>Hidaka96</i>
C4H5-1p↔C2H+C2H4	2.0E14	0.0	57.0E3	(195,-195)	<i>Hidaka96</i>
C4H5-1p+O2→C4H4+HO2	1.6E12	0.0	5.0E3	(196)	<i>Glaude 2000</i>
C4H5-1p↔C4H5-1s	5.0E12	0.0	37.4E3	(197,-197)	<i>Glaude 2000</i>

REACTIONS DE C4H5-2 (CH₃C≡CCH₂•, stabilisé par résonance)

C4H5-2↔H+C4H4	6.0E13	0.0	54.3E3	(198,-198)	<i>Glaude 2000</i>
C4H5-2↔iC4H5	5.0E12	0.0	50.5E3	(199,-199)	<i>Glaude 2000</i>

Les réactions suivantes sont déduites de celles de C3H3

C4H5-2+O↔C3H3+HCHO	1.4E14	0.0	0.0	(200,-200)	<i>Miller 92/Slagle91</i>
C4H5-2+OH↔C2H3+CO+CH3	4.0E13	0.0	0.0	(201,-201)	<i>Wang 97</i>
C4H5-2+O2↔CH2CO+CO+CH3	3.0E10	0.0	2.9E3	(202,-202)	<i>Miller 92/Slagle88</i>

Réactions de 1,3-C4H6 (CH₂=CHCH=CH₂, 1,3-butadiène)

C2H3+C2H3↔1,3-C4H6	9.8E14	-0.5	0.0	(203,-203)	<i>Hidaka 96</i>
1,3-C4H6 ↔ C4H4+H2	2.5E15	0.0	94.7E3	(204,-204)	<i>Hidaka 96</i>
1,3-C4H6→iC4H5+H	1.4E15	0.0	98.0E3	(205)	<i>Hidaka 96</i>
iC4H5+H→1,3-C4H6	1.0E12	0.0	0.0E3	(206)	<i>Hidaka 96</i>
C2H4+C2H3↔1,3-C4H6+H	5.0E11	0.0	7.3E3	(207,-207)	<i>Tsang 86</i>
1,3-C4H6+H↔nC4H5+H2	1.3E6	2.53	12.2E3	(208,-208)	<i>Wang 97</i>
1,3-C4H6+H↔iC4H5+H2	6.6E5	2.53	9.2E3	(209,-209)	<i>Wang 97</i>
1,3-C4H6+CH3↔nC4H5+CH4	7.0E13	0.0	18.5E3	(210,-210)	<i>Wu 87</i>
1,3-C4H6+CH3↔iC4H5+CH4	7.0E13	0.0	15.5E3	(211,-211)	<i>Wu 87 (*)</i>
1,3-C4H6+C2H3↔nC4H5+C2H4	5.0E14	0.0	22.8E3	(212,-212)	<i>Hidaka 96</i>
1,3-C4H6+C2H3↔iC4H5+C2H4	5.0E14	0.0	19.8E3	(213,-213)	<i>Hidaka 96 (*)</i>
1,3-C4H6+O↔aC3H5+H+CO	6.0E08	1.45	0.9E3	(214,-214)	<i>Leung 95</i> <i>Brezinsky 84</i>
1,3-C4H6+OH↔nC4H5+H2O	6.2E6	2.0	3.4E3	(215,-215)	<i>Wang 97</i>
1,3-C4H6+OH↔iC4H5+H2O	3.1E6	2.0	0.4E3	(216,-216)	<i>Wang 97</i>
1,3-C4H6+OH↔aC3H5+HCHO	2.8E12	0.0	-0.9E3	(217,-217)	<i>Lindstedt 96</i>
1,3-C4H6+OH↔CH3CHO+C2H3	5.6E12	0.0	-0.9E3	(218,-218)	<i>Lindstedt 96 (*)</i>
1,3-C4H6+O2↔iC4H5+HO2	4.0E13	0.0	57.9E3	(219,-219)	<i>Leung 95</i>
1,3-C4H6+C3H3↔nC4H5+aC3H4	1.0E13	0.0	22.5E3	(220,-220)	<i>Hidaka 96</i>
1,3-C4H6+C3H3↔iC4H5+aC3H4	1.0E13	0.0	19.5E3	(221,-221)	<i>Hidaka 96 (*)</i>

Réactions de 1,2-C₄H₆ (CH₂=C=CHCH₃, 1,2-butadiène)

1,2-C ₄ H ₆ ↔1,3-C ₄ H ₆	3.0E13	0.0	65.0E3	(222,-222)	<i>Hidaka 96</i>
1,2-C ₄ H ₆ ↔C ₃ H ₃ +CH ₃	1.0E12	0.0	59.5E3	(223,-223)	<i>Leung 95</i>
1,2-C ₄ H ₆ ↔iC ₄ H ₅ +H	4.2E15	0.0	92.6E3	(224,-224)	<i>Leung 95</i>
1,2-C ₄ H ₆ +H↔C ₂ H ₃ +C ₂ H ₄	4.0E11	0.0	0.0	(225,-225)	<i>Leung 95</i>
1,2-C ₄ H ₆ +H↔CH ₃ +aC ₃ H ₄	6.0E12	0.0	2.1E3	(226,-226)	<i>Hidaka 96</i>
1,2-C ₄ H ₆ +H↔iC ₄ H ₅ +H ₂	1.7E5	2.5	2.5E3	(227,-227)	<i>Tsang 91 (*)</i>
1,2-C ₄ H ₆ +CH ₃ ↔iC ₄ H ₅ +CH ₄	2.2E0	3.5	5.7E3	(228,-228)	<i>Tsang 91 (*)</i>
1,2-C ₄ H ₆ +C ₂ H ₅ ↔iC ₄ H ₅ +C ₂ H ₆	2.2E0	3.5	6.6E3	(229,-229)	<i>Tsang 91 (*)</i>
1,2-C ₄ H ₆ +O↔iC ₄ H ₅ +OH	1.7E11	0.7	5.9E3	(230,-230)	<i>Tsang 91 (*)</i>
1,2-C ₄ H ₆ +OH↔iC ₄ H ₅ +H ₂ O	3.1E6	2.0	-0.3E3	(231,-231)	<i>Tsang 91 (*)</i>
1,2-C ₄ H ₆ +HO ₂ ↔iC ₄ H ₅ +H ₂ O ₂	9.6E3	2.6	13.9E3	(232,-232)	<i>Tsang 91 (*)</i>

Réactions de cC₄H₆ (méthyl-cyclopropène)

CH ₂ (S)+pC ₃ H ₄ ↔cC ₄ H ₆	1.8E14	0.0	0.0	(233,-233)	<i>Leung 95</i>
cC ₄ H ₆ ↔1,3-C ₄ H ₆	3.0E13	0.0	42.3E3	(234,-234)	<i>Leung 95</i>
cC ₄ H ₆ ↔1,2-C ₄ H ₆	3.0E13	0.0	43.8E3	(235,-235)	<i>Leung 95</i>

Réactions de 1-C₄H₆ (CH≡CCH₂CH₃, 1-butyne)

1-C ₄ H ₆ ↔1,2-C ₄ H ₆	2.5E13	0.0	65.0E3	(236,-236)	<i>Hidaka 96</i>
1-C ₄ H ₆ ↔C ₄ H ₅ -1s+H	7.7E14	0.0	87.9E3	(237,-237)	<i>Kingas+ ΔH Melius</i>
1-C ₄ H ₆ ↔C ₄ H ₅ -1p+H	9.1E14	0.0	99.6E3	(238,-238)	<i>Kingas</i>
1-C ₄ H ₆ ↔C ₃ H ₃ +CH ₃	3.0E15	0.0	75.8E3	(239,-239)	<i>Hidaka 96</i>
1-C ₄ H ₆ +H↔CH ₃ +aC ₃ H ₄	3.2E12	0.0	1.7E3	(240,-240)	<i>Wagner 72</i>
1-C ₄ H ₆ +H↔C ₂ H ₅ +C ₂ H ₂	3.2E12	0.0	1.7E3	(241,-241)	<i>Wagner 72</i>

Les réactions suivantes sont déduites de celles de 1-C₄H₈ générées par EXGAS

1-C ₄ H ₆ +H↔H ₂ +C ₄ H ₅ -1s	5.4E4	2.5	-1.9E3	(242,-242)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +CH ₃ ↔CH ₄ +C ₄ H ₅ -1s	1.5E12	0.0	7.1E3	(243,-243)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +O↔OH+C ₄ H ₅ -1s	8.8E10	0.7	3.2E3	(244,-244)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +OH→H ₂ O+C ₄ H ₅ -1s	3.0E6	2.0	-1.5E3	(245)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +O ₂ →HO ₂ +C ₄ H ₅ -1s	1.4E12	0.0	41.4E3	(246)	<i>Ingham95</i>
1-C ₄ H ₆ +HO ₂ →H ₂ O ₂ +C ₄ H ₅ -1s	6.4E3	2.6	12.4E3	(247)	<i>Exgas</i>

Les réactions suivantes sont déduites de celles générées par EXGAS pour H primaires

1-C ₄ H ₆ +H↔H ₂ +C ₄ H ₅ -1p	2.9E7	2.0	7.7E3	(248,-248)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +CH ₃ ↔CH ₄ +C ₄ H ₅ -1p	0.3	4.0	8.2E3	(249,-249)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +O↔OH+C ₄ H ₅ -1p	5.1E13	0.0	7.8E3	(250,-250)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +OH→H ₂ O+C ₄ H ₅ -1p	2.7E6	2.0	-0.4E3	(251)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +O ₂ →HO ₂ +C ₄ H ₅ -1p	1.2E13	0.0	49.0E3	(252)	<i>Exgas</i>
1-C ₄ H ₆ +HO ₂ →H ₂ O ₂ +C ₄ H ₅ -1p	6.0E11	0.0	17.0E3	(253)	<i>Exgas</i>

Les réactions d'addition suivantes sont déduites de celles de pC₃H₄

1-C ₄ H ₆ +O↔CHCO+C ₂ H ₅	1.5E13	0.0	2.1E3	(254,-254)	<i>Warnatz 84</i>
1-C ₄ H ₆ +OH↔CH ₂ CO+C ₂ H ₅	4.3E11	0.0	-0.8E3	(255,-255)	<i>Boodaghians 87</i>

Réactions de 2-C₄H₆ (CH₃C≡CCH₃, 2-butyne)

2-C ₄ H ₆ ↔1,3-C ₄ H ₆	3.0E13	0.0	65.0E3	(256,-256)	<i>Hidaka 96</i>
2-C ₄ H ₆ ↔1,2-C ₄ H ₆	3.0E13	0.0	67.0E3	(257,-257)	<i>Hidaka 96</i>
2-C ₄ H ₆ +H↔CH ₃ +pC ₃ H ₄	6.5E12	0.0	1.7E3	(258,-258)	<i>Wagner 72</i>
2-C ₄ H ₆ ↔C ₄ H ₅ -2+H	2.0E14	0.0	87.3E3	(259,-259)	<i>Hidaka 96</i>

Les réactions suivantes sont déduites de celles de pC₃H₄

2-C ₄ H ₆ +H↔C ₄ H ₅ -2+H ₂	3.4E5	2.5	2.5E3	(260,-260)	<i>Tsang91 × par 2</i>
2-C ₄ H ₆ +CH ₃ ↔C ₄ H ₅ -2+CH ₄	4.4E0	3.5	5.7E3	(261,-261)	<i>Tsang91 × par 2</i>

2-C4H6+O \leftrightarrow CO+C2H3+CH3	1.5E13	0.0	2.1E3	(262,-262) Warnatz 84
2-C4H6+O \leftrightarrow OH+C4H5-2	1.2E11	0.7	7.6E3	(263,-263) Tsang91 par 2
2-C4H6+OH \leftrightarrow CO+C2H4+CH3	4.3E11	0.0	-0.8E3	(264,-264) Boodaghians 87
2-C4H6+OH \leftrightarrow C4H5-2+H2O	6.2E6	2.0	-0.3E3	(265,-265) Tsang91 \times par 2
2-C4H6+O2 \leftrightarrow C4H5-2+ HO2	4.2E12	0.0	44.0E3	(266,-266) Ingham 95 \times par 2 +4 kcal
2-C4H6+ HO2 \leftrightarrow C4H5-2+H2O2	1.9E4	2.6	13.9E3	(267,- 267) Tsang91 \times par 2

Réactions des espèces en C6

Les composés aromatiques et linéaires sont respectivement signalés par les symboles # et l

C3H3+C3H3 \leftrightarrow C6H6#	1.0E12	0.0	0.0	(268,- 268) Stein 90
-----------------------------------	--------	-----	-----	----------------------

Les 2 réactions suivantes sont déduites de celles de C3H3

C4H5-1s+C4H5-1s \leftrightarrow C8H10#	1.0E12	0.0	0.0	(269,- 269) Stein 90
C4H5-2+C4H5-2 \leftrightarrow C8H10#	1.0E12	0.0	0.0	(270,- 270) Stein 90

aC3H4+C3H3 \leftrightarrow C6H6#+H	1.4E12	0.0	10.0E3	(271,- 271) Hidaka 89
C4H2+C2H \rightarrow C6H2+H	4.0E13	0.0	0.0	(272) Colket 86
C6H2+H \rightarrow C4H2+C2H	9.3E14	0.0	15.1E3	(273) Colket 86
nC4H3+C2H2 \leftrightarrow C6H4#+H	3.0E-11	6.48	6.6E3	(274,- 274) Westmoreland 89
nC4H3+C2H2 \leftrightarrow lC6H4+H	2.77E-7	5.59	6.0E3	(275,- 275) Westmoreland 89
C4H4+C2H3 \leftrightarrow C6H6#+H	1.9E12	0.0	2.5E3	(276,- 276) Lindstedt 96
nC4H3+C2H2 \leftrightarrow C6H5#	7.0E14	-0.86	6.4E3	(277,- 277) Westmoreland 89
nC4H5+C2H2 \leftrightarrow lC6H6+H	3.47E-15	7.73	2.5E3	(278,- 278) Westmoreland 89
nC4H5+C2H2 \leftrightarrow C6H6#+H	2.38E8	1.18	3.7E3	(279,- 279) Westmoreland 89
nC4H5+C2H2 \leftrightarrow lC6H7	7.24E14	-1.38	4.0E3	(280,- 280) Westmoreland 89
nC4H5+C2H2 \leftrightarrow C6H7#	7.12E21	-3.64	6.3E3	(281,- 281) Westmoreland 89
C2H3+nC4H5 \leftrightarrow lC6H7+H	3.55E-43	16.16	-0.2E3	(282,- 282) Westmoreland 89
C2H3+nC4H5 \leftrightarrow lC6H8	1.50E13	-0.075	0.1E3	(283,- 283) Westmoreland 89
C2H3+nC4H5 \leftrightarrow C6H8#	8.53E13	-1.11	0.8E3	(285,- 285) Westmoreland 89
C2H3+nC4H5 \leftrightarrow C6H6#+H2	1.84E-13	7.07	-3.6E3	(286,- 286) Westmoreland 89
C2H3+1,3-C4H6 \leftrightarrow C6H8#+H	4.15E-11	6.39	2.4E3	(287,- 287) Westmoreland 89
C2H3+1,3-C4H6 \leftrightarrow lC6H8+H	5.48E-15	8.20	6.3E3	(288,- 288) Westmoreland 89
1,3-C4H6+C2H2 \leftrightarrow C6H8#	2.3E12	0.0	35.0E3	(289,- 289) Westmoreland 89
C2H3+1,3-C4H6 \leftrightarrow lC6H9	1.48E12	-0.17	3.2E3	(290,- 290) Westmoreland 89
C2H3+1,3-C4H6 \leftrightarrow C6H9#	7.06E13	-1.35	4.0E3	(291,- 291) Westmoreland 89
1,3-C4H6+C2H4 \leftrightarrow C6H10#	2.3E10	0.0	27.0E3	(292,- 292) Westmoreland 89

C6H5# \rightarrow lC6H5	3.5E13	0.0	65.0E3	(293) Colket 86
lC6H5 \rightarrow C6H5#	1.7E10	0.0	1.4E3	(294) Colket 86
C6H6#+H \leftrightarrow C6H5#+H2	3.0E7	2.0	5.0E3	(295,- 295) Miller 92
C6H6#+H \leftrightarrow C6H7#	4.0E13	0.0	4.3E3	(296,- 296) Colket 86
C6H6#+CH3 \rightarrow C6H5#+CH4	2.0E12	0.0	15.0E3	(297) Zhang 89
C6H6#+OH \leftrightarrow C6H5#+H2O	7.5E6	2.0	5.0E3	(298,- 298) Miller 92
C6H7# \rightarrow lC6H7	3.0E14	0.0	50.0E3	(299) Colket 86
lC6H7 \rightarrow C6H7#	2.3E11	0.0	0.4E3	(300) Colket 86
C6H8# \leftrightarrow C6H7#+H	5.0E15	0.0	72.33E3	(301,- 301) Dean 85

C6H10# \leftrightarrow C6H9#+H	5.0E15	0.0	81.4E3	(302,- 302) Dean 85
C6H10#+H \leftrightarrow C6H9#+H2	1.2E4	2.5	0.3E3	(303,- 303) Tsang
C6H10#+CH3 \leftrightarrow C6H9#+CH4	2.56E0	3.5	3.6E3	(304,- 304) Tsang
C6H10#+OH \leftrightarrow C6H9#+H2O	6.0E6	2.0	-1.5E3	(305,- 305) Tsang
C6H10#+O \leftrightarrow C6H9#+OH	1.8E11	0.7	3.8E3	(306,- 306) Tsang
C6H9#+O2 \leftrightarrow C6H8#+HO2	1.6E12	0.0	5.0E3	(307,- 307) Glaude2000
C6H8#+H \leftrightarrow C6H9#	7.2E12	0.0	2.9E3	(308,- 308) Tsang
C6H9#+H \leftrightarrow C6H8#+H2	3.3E12	0.0	0.0	(309,- 309) Dagaut

$C_6H_9\# + CH_3 \leftrightarrow C_6H_8\# + CH_4$	3.0E12	-0.32	0.13E3	(310,- 310) <i>Tsang</i>
$C_6H_9\# + OH \leftrightarrow C_6H_8\# + H_2O$	6.0E12	0.0	0.0	(311,- 311) <i>Tsang</i>
$C_6H_8\# + H \leftrightarrow C_6H_7\# + H_2$	1.2E4	2.5	0.3E3	(312,- 312) <i>Tsang</i>
$C_6H_8\# + CH_3 \leftrightarrow C_6H_7\# + CH_4$	2.56E0	3.5	3.6E3	(313,- 313) <i>Tsang</i>
$C_6H_8\# + OH \leftrightarrow C_6H_7\# + H_2O$	6.0E6	2.0	-1.5E3	(314,- 314) <i>Tsang</i>
$C_6H_8\# + O \leftrightarrow C_6H_7\# + OH$	1.8E11	0.7	3.8E3	(315,- 315) <i>Tsang</i>

Références bibliographiques :

- Baulch D.L., Cobos C.J., Cox R.A., Franck P., Hayman G.D., Just Th., Kerr J.A., Murrells T.P., Pilling M.J., Troe J., Walker R.W., Warnatz J. - *Combust. Flame*, 98, 59 (1994).
- Boodaghians R.B., Hall I.W., Toby F.S., R.P. Wayne - *J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2*, 83, 2073 (1987).
- Braun-Unkloff M., Franck P., Just T. - 22nd Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, 1053 (1989).
- Brezinsky K., Burke E.J., Glassman I. - 20th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 613 (1984).
- Colket M.B. - 21st Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 851 (1986).
- Dagaut P., Cathonnet M., Aboussi B., Boettner J.C. - *J. Chim. Phys.*, 87, 1159 (1990).
- Dean A.M. - *J. Phys. Chem.*, 89, 4600 (1985).
- Dean A.D., Westmoreland P.R. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 19, 207 (1987).
- Douté C. - Thèse de l'Université d'Orléans (1995).
- Von Herbrechtsmeier P., H.G. Wagner - *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 76, 517 (1972).
- Hidaka Y., Nakamura T., Miyauchi A., Shiraishi T., Kawano H. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 21, p. 643 (1989).
- Hidaka Y., Higashihara T., Ninomiya N., Masaoka H., Nakamura T., Kawano H. - *Int. J. Chem. Kinet.*, 28, 137 (1996).
- Leeds (web) <http://chem.leeds.ac.uk/Combustion/Combustion.html>.
- Leung K.M., Linstedt R.P. - *Combust. Flame*, 102, 129 (1995).
- Linstedt R.P., Skevis G. - 26th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 703 (1996).
- Liu A., Mulac W.A., Jonah C.P. - *J. Phys. Chem.*, 92, 131 (1988).
- Marinov N., Pitz W.J., Westbrook C.K., Castaldi M.J., Senkan S.M. - *Comb. Sci. Tech.* 116-117, 211 (1996).
- Miller J.A., Melius C.F. - *Combust. Flame*, 91, p. 21 (1992).
- Peeters J., Devriendt C.K. - 26th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 1001 (1996).
- Slagle I.R., Gutman D. - *Symp. Int. Combust. Proc.*, 21, 875 (1988).
- Slagle I.R., Bernhardt J.R., Gutman D., Hanning-Lee M.A., Pilling M.J. - *J. Phys. Chem.*, 94, 3652 (1990).
- Slagle I.R., Gmurczyk G.W., Batt L., Gutman D. - *Symp. Int. Combust. Proc.*, 23, 115 (1991).
- Stein S.E., Walker J.A., Suryan M.M., Fahr A. - 23rd Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 85 (1990).
- Tsang W., Hampson R.F. - *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 15, n°3, 1087 (1986).
- R.F. Tsang R.F. - *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 20, n°2, 221 (1991).
- Wagner H.G., Zellner R. - *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 76, 518 (1972).
- Walker R.W. - *Chemical Kinetics for Combustion (CHEMCOM)*, p. 61 (1993).
- H. Wang, M. Frenklach - *Combust. Flame*, 110, 173 (1997).
- Warnatz J. - Springer-Verlag, N.Y., 197 (1984).
- Weissman M., Benson S.W. - *Prog. Energy Combust. Sci.*, 15, 273 (1989).
- Westbrook C.K., Dryer F.L., Schug K.P. - 19th Symp. (Int.) Comb., The Combustion Institute, p. 153 (1982).
- Westmoreland P.R., Dean A.M., Howard J.B., Longwell J.P. - *J. Phys. Chem.*, 93, 8171 (1989).
- Wu C.H., Kern R.D. - *J. Phys. Chem.*, 91, 6291 (1987).
- Zhang H.X., Ahonkhai S.I., Back M.H. - *Can. J. Chem.*, 67, 1541 (1989).

ANNEXE II-C

MECANISME D'OXYDATION DU TOLUENE

REACTIONS	A	n	E _a	References	n°
<i>Les constantes de vitesse sont données à 101 kPa ($k=A T^n \exp(-E_a/RT)$) en cm³, mol, s, cal et ont été estimées suivant les règles décrites en annexe I.</i>					
MECANISME PRIMAIRE					
Réactions du toluène					
<i>Initiations unimoléculaires</i>					
toluène=benzyl+H	1.0x10 ¹⁵	0.0	88.9	HIPPLER90 [32]	(1)
toluène=C6H5+CH3	1.0x10 ¹⁷	0.0	97.0	estimé ^a	(2)
<i>Initiations bimoléculaires</i>					
toluène+O2=benzyl+HO2	2.1x10 ¹²	0.0	38.6	estimé ^b	(3)
<i>Additions</i>					
toluène+H=C6H6+CH3	5.8x10 ¹³	0.0	8.1	BAULCH94 [27]	(4)
toluène+O=OC6H4CH3+H	1.7x10 ¹³	0.0	3.6	TAPPE89 [33]	(5)
toluène+OH=HOC6H4CH3+H	1.3x10 ¹³	0.0	10.6	estimé ^c	(6)
<i>Métathèses</i>					
<i>Métathèses avec arrachage d'un atome d'hydrogène benzylique</i>					
toluène+H=benzyl+H2	1.2x10 ¹⁴	0.0	8.4	HIPPLER90	(7)
toluène+O=benzyl+OH	6.3x10 ¹¹	0.0	0.0	HOEMANN90 [34]	(8)
toluène+OH=benzyl+H2O	5.2x10 ⁹ 1.0	0.87		BAULCH94	(9)
toluène+HO2=benzyl+H2O2	4.0x10 ¹¹	0.0	14.0	BAULCH94	(10)
toluène+CH3=benzyl+CH4	1.6x10 ¹²	0.0	11.1	COLKET94 [35]	(11)
toluène+C2H3=benzyl+C2H4	4.0x10 ¹²	0.0	8.0	COLKET94	(12)
toluène+C3H5=benzyl+C3H6	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^d	(13)
toluène+C3H3=benzyl+pC3H4	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^d	(14)
toluène+iC4H5=benzyl+1,3-C4H6	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^d	(15)
toluène+nC4H5=benzyl+1,3-C4H6	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^d	(16)
toluène+C5H5=benzyl+C5H6	1.6x10 ¹²	0.0	11.1	estimé ^d	(17)
toluène+C6H5=benzyl+C6H6	7.9x10 ¹³	0.0	12.0	HECKMANN96 [36]	(18)
toluène+C6H5O=benzyl+C6H5OH	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^d	(19)
toluène+C6H4CH3=benzyl+toluène	7.9x10 ¹³	0.0	12.0	estimé ^e	(20)
toluène+OC6H4CH3=benzyl+HOC6H4CH3	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^d	(21)
toluène+C6H5CH2OO=benzyl+C6H5CH2OOH	4.0x10 ¹¹	0.0	14.0	estimé ^f	(22)
toluène+C6H5CH2O=benzyl+C6H5CH2OH	1.6x10 ¹¹	0.0	11.1	estimé ^d	(23)
toluène+HOC6H4CH2=benzyl+HOC6H4CH3	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^d	(24)
<i>Métathèses avec arrachage d'un atome d'hydrogène phénylique</i>					
toluène+H=C6H4CH3+H2	6.0x10 ⁸ 1.0	16.8		estimé ^c	(25)
toluène+O=C6H4CH3+OH	2.0x10 ¹³	0.0	14.7	estimé ^c	(26)
toluène+OH=C6H4CH3+H2O	1.6x10 ⁸ 1.42	1.45		estimé ^c	(27)
toluène+HO2=C6H4CH3+H2O2	4.0x10 ¹¹	0.0	28.9	estimé ^c	(28)
toluène+CH3=C6H4CH3+CH4	2.0x10 ¹²	0.0	15.0	estimé ^c	(29)
Réactions du radical benzyle					
<i>Décompositions par bêta-scission</i>					
benzyl=C5H5+C2H2	6.0x10 ¹³	0.0	70.0	COLKET94	(30)
benzyl=C3H3+C4H4	2.0x10 ¹⁴	0.0	83.6	COLKET94	(31)
<i>Réactions avec l'oxygène moléculaire</i>					
benzyl+O2=C6H5CH2OO	4.6x10 ¹¹	0.0	-0.38	FENTER94 [37]	(32)
benzyl+O2=C6H5CH2O+O	6.3x10 ¹²	0.0	40.0	LINSTEDT96 [21]	(33)
<i>Réactions de terminaison</i>					
benzyl+O=C6H5+HCHO	3.5x10 ¹³	0.0	0.0	EMDEE92 [2]	(34)
benzyl+O=C6H5CHO+H	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ^g	(35)
benzyl+OH=C6H5CH2OH	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	HIPPLER90' [38]	(36)
benzyl+HO2=C6H5CH2OOH	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	HIPPLER90'	(37)
etC6H5=benzyl+CH3	6.1x10 ¹⁵	0.0	75.1	BAULCH92 [39]	(38)
2benzyl=bibenzyl	2.5x10 ¹¹	0.4	0.0	MULLER88 [40]	(39)
Réactions des radicaux méthyl-phényliques					
<i>Réactions avec l'oxygène moléculaire</i>					
C6H4CH3+O2=OC6H4CH3+O	2.6x10 ¹³	0.0	6.1	estimé ^h	(40)
C6H4CH3+O2=OC6H4O+CH3	3.0x10 ¹³	0.0	9.0	estimé ^h	(41)

Réactions de terminaison

C6H4CH3+H=toluène	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ⁱ	(42)
C6H4CH3+H= benzyl+H	1.0x10 ¹³	0.0	0.0	MILLER92 [41]	(43)
C6H4CH3+O=OC6H4CH3	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ^h	(44)
C6H4CH3+OH=HOC6H4CH3	1.0x10 ¹³	0.0	0.0	estimé ^h	(45)
C6H4CH3+CH3=xylene	1.2x10 ⁶ 1.96	-3.7	estimé ^j	(46)	
C6H4CH3+HO2=OC6H4CH3+OH	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^h	(47)

Réactions des radicaux benzylperoxyles*Réactions d'isomérisation-décomposition*

C6H5CH2OO=C6H5CHO+OH	3.4x10 ⁹ 1.0	37.5	estimé ^k	(48)
----------------------	-------------------------	------	---------------------	------

Réactions de combinaison

C6H5CH2OO+H=C6H5CH2OOH	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ⁱ	(49)
------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

Réactions de dismutation

C6H5CH2OO+HO2=C6H5CH2OOH+O2	2.0x10 ¹¹	0.0	0.0	estimé ^l	(50)
-----------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

2C6H5CH2OO=C6H5CH2OH+C6H5CHO+O2	1.4x10 ¹⁰	0.0	-0.72	estimé ^l	(51)
---------------------------------	----------------------	-----	-------	---------------------	------

C6H5CH2OO+C6H5CH2OO=2C6H5CH2O+O2	6.3x10 ¹⁰	0.0	-0.72	estimé ^l	(52)
----------------------------------	----------------------	-----	-------	---------------------	------

Réactions des radicaux benzyl alcoxyles*Décomposition par bêta-scission*

C6H5CH2O=H+C6H5CHO	2.0x10 ¹³	0.0	27.5	estimé ^m	(53)
--------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CH2O=C6H5+HCHO	2.0x10 ¹³	0.0	27.5	estimé ^m	(54)
--------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

Réactions avec l'oxygène moléculaire

C6H5CH2O+O2=HO2+C6H5CHO	6.0x10 ¹⁰	0.0	1.6	estimé ⁿ	(55)
-------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

Réactions des radicaux cresoxyles*Elimination de CO avec réarrangement*

OC6H4CH3=H+C6H6+CO	3.0x10 ¹¹	0.0	43.8	estimé ^o	(56)
--------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

OC6H4CH3=H+C4H6+C2H2+CO	3.1x10 ¹¹	0.0	43.8	estimé ^o	(57)
-------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

OC6H4CH3=C3H3+C3H4+CHO	1.5x10 ¹¹	0.0	43.8	estimé ^o	(58)
------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

Réactions de terminaison

OC6H4CH3+H=HOC6H4CH3	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ⁱ	(59)
----------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

MECANISME SECONDAIRE**Réactions du benzaldéhyde et des radicaux en dérivant**

C6H5CHO=C6H5CO+H	4.0x10 ¹⁵	0.0	83.7	GRELA86 [42]	(60)
------------------	----------------------	-----	------	--------------	------

C6H5CHO+O2=C6H5CO+HO2	7.0x10 ¹¹	0.0	39.5	estimé ^b	(61)
-----------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+H=C6H6+R5CHO	5.8x10 ¹³	0.0	8.1	estimé ^p	(62)
----------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

C6H5CHO+H=C6H5CO+H2	4.0x10 ¹³	0.0	3.2	estimé ^q	(63)
---------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

C6H5CHO+O=C6H5CO+OH	6.0x10 ¹²	0.0	1.8	BAULCH94	(64)
---------------------	----------------------	-----	-----	----------	------

C6H5CHO+OH=C6H5CO+H2O	7.8x10 ¹²	0.0	0.0	BAULCH94	(65)
-----------------------	----------------------	-----	-----	----------	------

C6H5CHO+HO2=C6H5CO+H2O2	3.0x10 ¹²	0.0	11.0	estimé ^q	(66)
-------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+CH3=C6H5CO+CH4	2.0x10 ⁻⁶	5.6	1.5	estimé ^q	(67)
------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

C6H5CHO+C2H5=C6H5CO+C2H6	1.3x10 ¹²	0.0	7.5	estimé ^q	(68)
--------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

C6H5CHO+C3H5=C6H5CO+C3H6	1.3x10 ¹²	0.0	11.5	estimé ^r	(69)
--------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+iC4H5=Ch6H5CO+1,3-C4H6	1.3x10 ¹²	0.0	11.5	estimé ^r	(70)
--------------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+nC4H5=C6H5CO+1,3-C4H6	1.3x10 ¹²	0.0	7.5	estimé ^r	(71)
-------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

C6H5CHO+C5H5=C6H5CO+C5H6	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(72)
--------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+C6H5=C6H5CO+C6H6	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(73)
--------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+benzyl=toluène+C6H5CO	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(74)
-------------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+C6H5O=C6H5CO+C6H5OH	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(75)
-----------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+OC6H4CH3=C6H5CO+HOC6H4CH3	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(76)
-----------------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CHO+HOC6H4CH2=C6H5CO+HOC6H4CH3	1.3x10 ¹¹	0.0	11.5	estimé ^r	(77)
------------------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

C6H5CO=C6H5+CO	4.0x10 ¹⁴	0.0	29.5	SOLLY71 [43]	(78)
----------------	----------------------	-----	------	--------------	------

Réactions du benzyl hydroperoxyde et des radicaux en dérivant

C6H5CH2OOH=C6H5CH2O+OH	1.5x10 ¹⁶	0.0	42.0	estimé ^s	(79)
------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

Réactions du crésol et des radicaux en dérivant

HOC6H4CH3+O2=OC6H4CH3+HO2	1.0x10 ¹³	0.0	38.9	estimé ^t	(80)
---------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

HOC6H4CH3+O2=HOC6H4CH2+HO2	2.1x10 ¹²	0.0	39.7	estimé ^b	(81)
----------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

HOC6H4CH3+H=C6H5OH+CH3	5.8x10 ¹³	0.0	8.1	estimé ^p	(82)
------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+H=OC6H4CH3+H2	1.2x10 ¹⁴	0.0	12.4	estimé ^t	(83)
-------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

HOC6H4CH3+O=OC6H4CH3+OH	1.3x10 ¹³	0.0	2.9	estimé ^t	(84)
-------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+OH=OC6H4CH3+H2O	1.4x10 ⁸ 1.4	-0.96	estimé ^t	(85)
---------------------------	-------------------------	-------	---------------------	------

HOC6H4CH3+HO2=OC6H4CH3+H2O2	1.0x10 ¹²	0.0	10.0	estimé ^t	(86)
-----------------------------	----------------------	-----	------	---------------------	------

HOC6H4CH3+CH3=OC6H4CH3+CH4	1.8x10 ¹¹	0.0	7.7	estimé ^t	(87)
----------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+C6H5=OC6H4CH3+C6H6	4.9x10 ¹²	0.0	4.4	estimé ^t	(88)
------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+C5H5=OC6H4CH3+C5H6	4.9x10 ¹¹	0.0	9.4	estimé ^t	(89)
------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+C3H5=OC6H4CH3+C3H6	4.9x10 ¹¹	0.0	9.4	estimé ^t	(90)
------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+iC4H5=OC6H4CH3+1,3-C4H6	4.9x10 ¹¹	0.0	9.4	estimé ^t	(91)
-----------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

HOC6H4CH3+C6H5O=OC6H4CH3+C6H5OH	4.9x10 ¹¹	0.0	9.4	estimé ^t	(92)
---------------------------------	----------------------	-----	-----	---------------------	------

Annexe II

HOC6H4CH3+H=HOC6H4CH2+H2	1.2x10 ¹⁴	0.0	8.4	estimé ^p	(93)
HOC6H4CH3+O=HOC6H4CH2+OH	6.3x10 ¹¹	0.0	0.0	estimé ^p	(94)
HOC6H4CH3+OH=HOC6H4CH2+H2O	5.2x10 ⁹ 1.0	0.87	estimé ^p	(95)	
HOC6H4CH3+HO2=HOC6H4CH2+H2O2	4.0x10 ¹¹	0.0	14.0	estimé ^p	(96)
HOC6H4CH3+CH3=HOC6H4CH2+CH4	1.6x10 ¹²	0.0	11.1	estimé ^p	(97)
HOC6H4CH3+C3H5=HOC6H4CH2+C3H6	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^p	(98)
HOC6H4CH3+C3H3=HOC6H4CH2+pC3H4	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^p	(99)
HOC6H4CH3+iC4H5=HOC6H4CH2+1,3-C4H6	1.6x10 ¹²	0.0	15.1	estimé ^p	(100)
HOC6H4CH3+nC4H5=HOC6H4CH2+1,3-C4H6	1.6x10 ¹²	0.0	11.1	estimé ^p	(101)
HOC6H4CH3+C5H5=HOC6H4CH2+C5H6	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^p	(102)
HOC6H4CH3+C6H5=HOC6H4CH2+C6H6	7.9x10 ¹³	0.0	12.0	estimé ^p	(103)
HOC6H4CH3+C6H5O=HOC6H4CH2+C6H5OH	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^p	(104)
HOC6H4CH3+C6H4CH3=HOC6H4CH2+toluène	7.9x10 ¹³	0.0	12.0	estimé ^p	(105)
HOC6H4CH3+OC6H4CH3=HOC6H4CH2+HOC6H4CH3	1.6x10 ¹¹	0.0	15.1	estimé ^p	(106)
HOC6H4CH3+C6H5CH2OO=HOC6H4CH2+C6H5CH2OOH	4.0x10 ¹¹	0.0	14.0	estimé ^p	(107)
HOC6H4CH3+C6H5CH2O=HOC6H4CH2+C6H5CH2OH	1.6x10 ¹¹	0.0	11.1	estimé ^p	(108)
HOC6H4CH2+O2=HOC6H4CH2OO	4.6x10 ¹¹	0.0	-0.38	estimé ^u	(109)
HOC6H4CH2+O2=C6H4CH2O+O	6.3x10 ¹²	0.0	40.0	estimé ^u	(110)
HOC6H4CH2+H=HOC6H4CH3	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	estimé ⁱ	(111)
HOC6H4CH2+HO2=HOC6H4CH2OOH	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^u	(112)
HOC6H4CH2+CH3=C6H5OH+C2H4	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^v	(113)
HOC6H4CH2OO=HOC6H4CHO+OH	3.4x10 ⁹ 1.0	37.5	estimé ^w	(114)	
HOC6H4CH2O=H+HOC6H4CHO	2.0x10 ¹³	0.0	27.5	estimé ^x	(115)
HOC6H4CH2O=C6H4OH+HCHO	2.0x10 ¹³	0.0	27.5	estimé ^x	(116)
HOC6H4CH2O+O2=OOH+HOC6H4CHO	6.0x10 ¹⁰	0.0	1.6	estimé ^x	(117)
HOC6H4CHO+H=HOC6H4CO+H2	4.0x10 ¹³	0.0	3.2	estimé ^y	(118)
HOC6H4CHO+O=HOC6H4CO+OH	6.0x10 ¹²	0.0	1.8	estimé ^y	(119)
HOC6H4CHO+OH=HOC6H4CO+H2O	7.8x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^y	(120)
HOC6H4CHO+HO2=HOC6H4CO+H2O	3.0x10 ¹²	0.0	11.0	estimé ^y	(121)
HOC6H4CHO+CH3=HOC6H4CO+CH4	2.0x10 ⁻⁶	5.6	1.5	estimé ^y	(122)
HOC6H4CO=C6H5O+CO	4.0x10 ¹⁴	0.0	29.5	estimé ^z	(123)

Réactions de l'alcool benzylique et des radicaux en dérivant

C6H5CH2OH+O2=HO2+C6H5CHOH	1.4x10 ¹²	0.0	34.0	estimé ^b	(124)
C6H5CH2OH+O2=HO2+C6H5CH2O	2.0x10 ¹⁴	0.0	41.4	EMDEE92	(125)
C6H5CH2OH+H=C6H6+CH2OH	5.8x10 ¹³	0.0	8.1	estimé ^p	(126)
C6H5CH2OH+H=C6H5CHOH+H2	8.0x10 ¹³	0.0	6.4	estimé ^{aa}	(127)
C6H5CH2OH+O=C6H5CHOH+OH	4.2x10 ¹¹	0.0	-2.0	estimé ^{aa}	(128)
C6H5CH2OH+OH=C6H5CHOH+H2O	3.9x10 ⁹	1.0	-1.1	estimé ^{aa}	(129)
C6H5CH2OH+HO2=C6H5CHOH+H2O2	2.7x10 ¹¹	0.0	12.0	estimé ^{aa}	(130)
C6H5CH2OH+CH3=C6H5CHOH+CH4	1.1x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(131)
C6H5CH2OH+C3H3=C6H5CHOH+pC3H4	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(132)
C6H5CH2OH+C3H5=C6H5CHOH+C3H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(133)
C6H5CH2OH+iC4H5=C6H5CHOH+1,3-C4H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(134)
C6H5CH2OH+nC4H5=C6H5CHOH+1,3-C4H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(135)
C6H5CH2OH+C5H5=C6H5CHOH+C5H6	1.1x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(136)
C6H5CH2OH+C6H5=C6H5CHOH+C6H6	5.2x10 ¹³	0.0	10.0	estimé ^{aa}	(137)
C6H5CH2OH+C6H5O=C6H5CHOH+C6H5OH	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(138)
C6H5CH2OH+benzyl=C6H5CHOH+toluène	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(139)
C6H5CH2OH+C6H4CH3=C6H5CHOH+C6H5CH2OH	5.2x10 ¹³	0.0	10.0	estimé ^{aa}	(140)
C6H5CH2OH+OC6H4CH3=C6H5CHOH+HOC6H4CH3	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(141)
C6H5CH2OH+HOC6H4CH2=C6H5CHOH+HOC6H4CH3	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(142)
C6H5CH2OH+C6H5CH2O=C6H5CHOH+C6H5CH2OH	1.1x10 ¹¹	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(143)
C6H5CHOH=C6H5CHO+H	2.0x10 ¹⁴	0.0	23.3	estimé ^{bb}	(144)

Réactions de l'éthylbenzène et des radicaux en dérivant

etC6H5=C8H9+H	4.3x10 ¹⁴	0.0	83.6	estimé ^{cc}	(146)
etC6H5+O2=C8H9+HO2	1.4x10 ¹²	0.0	34.0	estimé ^b	(147)
etC6H5+O2=C8H9-1+HO2	1.2x10 ¹³	0.0	49.0	estimé ^{dd}	(148)
etC6H5+H=C6H6+C2H5	5.8x10 ¹³	0.0	8.1	estimé ^{aa}	(149)
etC6H5+H=C8H9+H2	8.0x10 ¹³	0.0	6.4	estimé ^{aa}	(150)
etC6H5+O=C8H9+OH	3.9x10 ⁹	1.0	-1.1	estimé ^{aa}	(151)
etC6H5+OH=C8H9+H2O	1.2x10 ¹⁴	0.0	8.4	estimé ^{aa}	(152)
etC6H5+HO2=C8H9+H2O2	2.7x10 ¹¹	0.0	12.0	estimé ^{aa}	(153)
etC6H5+CH3=C8H9+CH4	1.1x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(154)
etC6H5+C3H5=C8H9+C3H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(155)
etC6H5+iC4H5=C8H9+1,3-C4H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(156)
etC6H5+nC4H5=C8H9+1,3-C4H6	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(157)
etC6H+C5H5=C8H9+C5H6	1.1x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(158)
etC6H5+C6H5O=C8H9+C6H5OH	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(159)

etC6H5+benzyl=C8H9+toluène	1.1x10 ¹²	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(160)
etC6H5+OC6H4CH3=C8H9+HOC6H4CH3	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(161)
etC6H5+HOC6H4CH2=C8H9+HOC6H4CH3	1.1x10 ¹¹	0.0	13.1	estimé ^{aa}	(162)
etC6H5+H=C8H9-1+H2	2.8x10 ⁷	2.0	7.7	estimé ^{ee}	(163)
etC6H5+O=C8H9-1+OH	5.1x10 ¹³	0.0	7.8	estimé ^{ee}	(164)
etC6H5+OH=C8H9-1+H2O	2.7x10 ⁶	2.0	0.4	estimé ^{ee}	(165)
etC6H5+HO2=C8H9-1+H2O2	6.0x10 ¹¹	0.0	17.0	estimé ^{ee}	(166)
etC6H5+CH3=C8H9-1+CH4	0.3	4.0	8.2	estimé ^{ee}	(167)
C8H9=H+styrene	3.1x10 ¹³	0.0	50.7	MULLER88	(168)
C8H9-1=H+styrene	1.6x10 ¹³	0.0	34.8	estimé ^{ff}	(169)
C8H9-1=C2H4+C6H5	7.1x10 ¹⁴	0.0	43.5	EBERT78 [44]	(170)
C8H9+O2=HO2+styrene	7.0x10 ¹¹	0.0	15.0	estimé ^{gg}	(171)
C8H9-1+O2=HO2+styrene	1.5x10 ¹²	0.0	5.0	estimé ^{gg}	(172)
C8H9+HO2=OH+C6H5CHO	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^{cc}	(173)
C8H9-1+HO2=OH+HCHO+benzyl	5.0x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^{cc}	(174)
Réactions du styrène et des radicaux en dérivant					
styrene+O2=HO2+C6H5C2H2	2.0x10 ¹³	0.0	57.9	estimé ^{hh}	(175)
styrene+O=C6H5+CH2CHO	3.0x10 ⁸	1.45	0.9	estimé ^{hh}	(176)
styrene+OH=benzyl+HCHO	1.4x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^{hh}	(177)
styrene+OH=C6H5CHO+CH3	2.8x10 ¹²	0.0	0.0	estimé ^{hh}	(178)
styrene+H=C6H5C2H2+H2	6.6x10 ⁵	2.53	9.2	estimé ^{hh}	(179)
styrene+OH=C6H5C2H2+H2O	1.5x10 ⁶	2.0	0.4	estimé ^{hh}	(180)
styrene+CH3=C8H7+CH4	3.5x10 ¹³	0.0	15.5	estimé ^{hh}	(181)
C8H7+O2=C6H5CO+HCHO	4.5x10 ¹⁶	-1.39	1.0	estimé ⁱⁱ	(182)
Réactions du bibenzyl et des radicaux en dérivant					
Bibenzyl=C14H13+H	1.0x10 ¹⁴	0.0	83.0	HIPPLER90'	(183)
bibenzyl+O2=C14H13+HO2	2.8x10 ¹²	0.0	35.0	estimé ^b	(184)
bibenzyl+H=C14H13+H2	1.6x10 ¹⁴	0.0	6.4	estimé ^{aa}	(185)
bibenzyl+O=C14H13+OH	8.4x10 ¹¹	0.0	-2.0	estimé ^{aa}	(186)
bibenzyl+OH=C14H13+H2O	7.0x10 ⁹	1.0	-1.1	estimé ^{aa}	(187)
bibenzyl+HO2=C14H13+H2O2	5.4x10 ¹¹	0.0	12.0	estimé ^{aa}	(188)
bibenzyl+CH3=C14H13+CH4	2.2x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(189)
bibenzyl+C3H5=C14H13+C3H6	2.2x10 ¹²	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(190)
bibenzyl+C6H5O=C14H13+C6H5OH	2.2x10 ¹¹	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(191)
bibenzyl+benzyl=C14H13+toluène	2.2x10 ¹¹	0.0	9.1	estimé ^{aa}	(192)
C14H13=stilbene+H	7.1x10 ¹⁴	0.0	30.0	EBERT78	(193)

- a : Constante de vitesse prise égale à celle proposée par Rao *et al* [45] multiplié par 10.
- b : La constante de vitesse de cette initiation bimoléculaire avec l'oxygène a été calculée en suivant les recommandations de Ingham *et al* [46] : A est égal à $n \times 7 \times 10^{11} \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, où n est le nombre d'atome d'hydrogène benzylique pouvant être arraché, et l'énergie d'activation est égale à l'enthalpie de la réaction.
- c : Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le benzène [11].
- d : Constante de vitesse égale à celle proposée par Colket *et al* [35] pour la métathèse avec arrachage d'un atome d'hydrogène par un radical méthyle A étant divisée par 10 pour les radicaux cycliques et l'énergie d'activation étant augmentée de 4 kcal/mol pour les radicaux stabilisés par résonance.
- e : Constante de vitesse égale à celle proposée par Heckmann *et al* [36] pour la métathèse avec arrachage d'un atome d'hydrogène par un radical phényle.
- f : Constante de vitesse égale à celle proposée par Baulch *et al* [27] pour la métathèse avec arrachage d'un atome d'hydrogène par le radical $\bullet\text{HO}_2$.
- g : Constante de vitesse proposée par Hippler *et al* [38] avec un facteur pré-exponentiel divisé par 4.
- h : Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour les radicaux phényles [11].
- i : Constante de vitesse égale à celle proposée par Allara *et al.* [47] pour la recombinaison des atomes d'hydrogène H• avec les radicaux alkyles.
- j : Constante de vitesse égale à celle proposée par Rao *et al.* [45] pour la réaction similaire impliquant les radicaux phényles.
- k : Données cinétiques de l'isomérisation des radicaux peroxytes calculées à partir de la méthode proposée par Warth *et al.* [48] pour les radicaux alkylperoxytes.
- l : Constante de vitesse égale à celle proposée par Warth *et al.* [48] pour les dismutations des radicaux alkylperoxytes.
- m : Pour les bêta-scissions impliquant la rupture de liaisons C-C ou C-H, le facteur préexponentiel est une valeur moyenne des bêta-scissions [49] et les énergies d'activation ont été estimées à partir de la thermochimie, afin d'obtenir les meilleurs résultats de simulation.
- n : Constante de vitesse égale celle proposée par Baulch *et al.* [39] pour la réaction similaire impliquant les radicaux ethoxytes.
- o : La constante de vitesse globale a été prise égale à celle de la décomposition des radicaux phenoxytes qui donne du monoxyde de carbone et des radicaux cyclopentadiényle, comme proposé par Franck *et al.* [50].

- p: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le toluène.
- q: Constante de vitesse estimée à partir des paramètres proposés pour l'acétaldéhyde par Warnatz [51] (pour les atomes $\bullet\text{H}$), par Baulch *et al* [26] (pour les radicaux $\bullet\text{HO}_2$ et $\bullet\text{CH}_3$) et par Holhein *et al.* [52] (pour le radical $\bullet\text{C}_2\text{H}_5$) avec une énergie d'activation diminuée de 1 kcal/mol en raison de la stabilisation par résonance des radicaux obtenus.
- r: Constante de vitesse égale à celle des métathèses avec arrachage des atomes d'hydrogène par les radicaux éthyliques avec A divisé par 10 pour les radicaux cycliques et avec une énergie d'activation augmentée de 4 kcal/mol pour les radicaux stabilisés par résonance.
- s: Constante de vitesse égale à celle de la décomposition des hydroperoxydes proposée par Sahetchian *et al.* [53].
- t: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le phénol [11].
- u: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical benzyle.
- v: Constante de vitesse égale à celle de la combinaison calculée en utilisant le logiciel KINGAS [54] basé sur les méthodes de cinétique thermochimique [31]. L'énergie d'activation des recombinaisons est prise égale à zéro et le facteur pré-exponentiel est estimé à partir de la théorie des collisions modifiée [48].
- w: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical benzyl peroxy.
- x: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical benzyl alcoxy.
- y: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le benzaldéhyde.
- z: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical $\bullet\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}$.
- aa: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le toluène avec A multiplié par 2/3 (pour l'alcool benzylique et l'éthyl benzène) et par 4/3 (pour le bibenzyle) pour prendre en compte le nombre d'atome d'hydrogène arrachable et avec une énergie d'activation de 2 kcal/mol plus faible en raison de la présence d'une fonction OH (pour l'alcool benzylique) ou pour prendre en compte la métathèse par arrachage d'atomes d'hydrogène secondaire au lieu de primaire (pour l'éthyl benzène et le bibenzyle).
- bb: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical $\bullet\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$ proposé par Heicklen *et al.* [55].
- cc: Constante de vitesse calculée en utilisant le logiciel KINGAS [54].
- dd: Constante de vitesse égale à celle de l'initiation bimoléculaire des alcanes proposé par Warth *et al.* [48].
- ee: Constante de vitesse égale à celle de la métathèse par arrachage de trois atomes d'hydrogène alkyliques primaires. comme proposé par Warth *et al.* [48].
- ff: Constante de vitesse égale à celle de la bêta-scission d'un radical alkényle avec départ d'un atome d'hydrogène allylique[49].
- gg: Constante de vitesse égale à celle de l'oxydation d'un radical allylique (pour les radicaux $\bullet\text{C}_6\text{H}_5\text{CHCH}_3$) comme proposé par Touchard *et al.* (2005) ou d'un radical alkylique (pour les radicaux $\bullet\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{CH}_2$) comme proposé par Warth *et al.* [48].
- hh: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le 1,3-butadiène [24] avec A divisé par 2 pour prendre en compte le nombre de double liaison.
- ii: Constante de vitesse égale à celle de la réaction similaire pour le radical vinyle $\bullet\text{C}_2\text{H}_3$ proposé par Mebel *et al.* [57].

ANNEXE II-D

MECANISME PRIMAIRE D'OXYDATION DU 1-PENTENE

A HAUTE TEMPERATURE

REACTIONS	A	n	E _a n°
<i>Les constantes de vitesse sont données à 101 kPa ($k=A T^n \exp(-E_a/RT)$) en cm³, mol, s, cal et ont été estimées suivant les règles décrites en annexe I.</i>			
Réactions ène-			
1-PENTENE+1-PENTENE→C10H20	8.4x10 ¹	2.5	36700 (1)
1-PENTENE+1-PENTENE→C10H20	1.1x10 ³	2.1	36000 (2)
Reaction rétro-ène			
1-PENTENE→C2H4+C3H6	3.2x10 ¹²	0.0	57430 (3)
Initiations unimoléculaire			
1-PENTENE↔CH2=CHCH2CH2+.CH3	1.1x10 ¹⁶	0.0	85097 (4) ^a
1-PENTENE↔.aC3H5+.C2H5	1.0x10 ¹⁶	0.0	71000 (5) ^b
1-PENTENE→.H+.CH2=CHCHCH2CH3	7.7x10 ¹³	0.0	84970 (6) ^a
1-PENTENE↔.C2H3+.nC3H7	9.9x10 ¹⁵	0.0	101999
	(7) ^a		
Initiations bimoléculaire			
1-PENTENE+O2↔.OOH+.CH2=CHCH2CH2CH2	2.1x10 ¹³	0.0	52839 (8)
1-PENTENE+O2↔.OOH+.CH=CHCH2CH2CH3	2.0x10 ¹³	0.0	57600 (9)
1-PENTENE+O2↔.OOH+.CH2=CCH2CH2CH3	2.0x10 ¹²	0.0	55600 (10)
1-PENTENE+O2↔.OOH+.CH2=CHCHCH2CH3	1.4x10 ¹²	0.0	34490 (11)
1-PENTENE+O2↔.OOH+.CH2=CHCH2CHCH3	1.4x10 ¹³	0.0	50175 (12)
1-PENTENE+1-PENTENE↔.CH3CHCH2CH2CH3+.CH2=CHCHCH2CH3	7.4x10 ¹³	0.0	51300 (13)
1-PENTENE+1-PENTENE↔.CH2CH2CH2CH2CH3+.CH2=CHCHCH2CH3	3.8x10 ¹⁴	0.0	54200 (14)
Additions de radicaux sur la double liaison			
.H+1-PENTENE↔.CH3CHCH2CH2CH3	1.3x10 ¹³	0.0	1560 (15)
.H+1-PENTENE↔.CH2CH2CH2CH2CH3	1.3x10 ¹³	0.0	3260 (16)
.OH+1-PENTENE→C3H7CHO+.CH3	1.4x10 ¹²	0.0	-1040 (17)
.OH+1-PENTENE→HCHO+.CH2CH2CH2CH3	1.4x10 ¹²	0.0	-1040 (18)
.CH3+1-PENTENE↔.CH3CH2CHCH2CH2CH3	1.7x10 ¹¹	0.0	7400 (19)
.CH3+1-PENTENE↔.CH2CH(CH3)CH2CH2CH3	9.6x10 ¹⁰	0.0	8000 (20)
.OOH+1-PENTENE→.OH+ETHYLOXIRANE	1.0x10 ¹²	0.0	14200 (21)
.O.+1-PENTENE→.CH3CO+.nC3H7	6.0x10 ⁴	2.56	-1100 (22)
.O.+1-PENTENE→.CHO+.CH2CH2CH2CH3	6.0x10 ⁴	2.56	-1100 (23)
.O.+1-PENTENE→HCHO+C4H8	6.0x10 ⁴	2.56	-1100 (24)
Isomérisations			
.CH2=CHCH2CH2CH2↔.CH2=CCH2CH2CH3	2.9x10 ⁸	1.0	19100 (25) ^a
.CH2=CHCH2CH2CH2↔.CH=CHCH2CH2CH3	5.7x10 ⁸	1.0	16200 (26) ^a
.CH=CHCH2CH2CH3↔.CH2=CHCH2CHCH3	3.3x10 ⁹	1.0	16900 (27) ^a
.CH2=CHCHCH2CH3↔.CH3CH=CHCHCH3	1.7x10 ⁹	1.0	21400 (28) ^a
.CH2=CHCHCH2CH3↔.CH3CH=CHCH2CH2	4.3x10 ⁸	1.0	24900 (29) ^a
.CH3CHCH2CH2CH3↔.CH2CH2CH2CH2CH3	8.6x10 ⁸	1.0	19800 (30) ^a
.CH3CH2CHCH2CH2CH3↔.CH3CH2CH2CH2CH2CH2	8.6x10 ⁸	1.0	19800 (31) ^a
.CH2CH(CH3)CH2CH2CH3↔.CH3CH(CH3)CH2CHCH3	5.7x10 ⁸	1.0	17300 (32) ^a
.CH2CH(CH3)CH2CH2CH3↔.CH3CH(CH3)CH2CH2CH2	1.5x10 ⁸	1.0	14500 (33) ^a
.C3H7CO↔.C3H6CHO	8.6x10 ⁸	1.0	25800 (34) ^a
.CH3CH=CHCH2CH2↔.CH3C=CHCH2CH3	1.7x10 ⁹	1.0	18700 (35) ^a
.CH3CH2CH2CH2CH2CH2↔.CH3CHCH2CH2CH2CH3	9.9x10 ⁷	1.0	12000 (36) ^a
.CH3CH(CH3)CH2CH2CH2↔.CH3C(CH3)CH2CH2CH3	2.9x10 ⁸	1.0	15300 (37) ^a
.CH2=CHCH2CH2↔.CH=CHCH2CH3	3.3x10 ⁹	1.0	20700 (38) ^a
Bêta-scissions			
.CH2CH2CH2CH3→.C2H5+C2H4	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (39)
.CH2CH2CH2CH3→.H+C4H8	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (40)
.CH2=CHCH2CH2CH2→.aC3H5+C2H4	3.3x10 ¹³	0.0	22500 (41)
.CH2=CHCH2CH2CH2→.H+C5H8	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (42)
.CH=CHCH2CH2CH3→.nC3H7+C2H2	2.0x10 ¹³	0.0	33000 (43)
.CH=CHCH2CH2CH3→.H+C5H8-YNE	4.0x10 ¹²	0.0	36500 (44)
.CH2=CCH2CH2CH3→.H+C5H8	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (45)
.CH2=CCH2CH2CH3→.H+C5H8-YNE	8.0x10 ¹²	0.0	38000 (46)
.CH2=CCH2CH2CH3→.C2H5+AC3H4	2.0x10 ¹³	0.0	31000 (47)
.CH2=CHCHCH2CH3→.CH3+C4H6	6.5x10 ¹²	0.0	38200 (48)

.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	1.5x10 ¹³	0.0	50500 (49)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	7.0x10 ¹²	0.0	60000 (50)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.C ₂ H ₃ +C ₃ H ₆	2.0x10 ¹³	0.0	35500 (51)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	3.2x10 ¹³	0.0	34800 (52)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	3.0x10 ¹³	0.0	39000 (53)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.C ₂ H ₅ +C ₃ H ₆	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (54)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+2-PENTENE	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (55)
.CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.nC ₃ H ₇ +C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (56)
.CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.C ₂ H ₅ +C ₄ H ₈	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (57)
.CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (58)
.CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (59)
.CH ₂ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.nC ₃ H ₇ +C ₃ H ₆	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (60)
.CH ₂ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	1.5x10 ¹³	0.0	37500 (61)
.C ₃ H ₇ CO→.C ₂ H ₅ +CH ₂ CO	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (62)
.C ₃ H ₇ CO→.H+C ₃ H ₆ CO	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (63)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	1.4x10 ¹³	0.0	60000 (64)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	3.0x10 ¹³	0.0	51500 (65)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₂ →sC ₃ H ₅ +C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	35500 (66)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₂ →.H+C ₅ H ₈	3.2x10 ¹³	0.0	34800 (67)
.CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ →.CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ +C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (68)
.CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (69)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →iC ₃ H ₇ +C ₃ H ₆	2.0x10 ¹³	0.0	27700 (70)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	39000 (71)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (72)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₂ →.iC ₄ H ₉ +C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (73)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₂ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (74)
.C ₃ H ₆ CHO→.CH ₂ CHO+C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (75)
.C ₃ H ₆ CHO→H+C ₃ H ₅ CHO	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (76)
.CH ₃ C=CHCH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈	3.0x10 ¹³	0.0	40000 (77)
.CH ₃ C=CHCH ₂ CH ₃ →.H+C ₅ H ₈ -YNE	4.0x10 ¹²	0.0	36500 (78)
.CH ₃ C=CHCH ₂ CH ₃ →.C ₂ H ₅ +PC ₃ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	33000 (79)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.nC ₃ H ₇ +C ₃ H ₆	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (80)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (81)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	39000 (82)
.CH ₃ C (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.C ₂ H ₅ +C ₄ H ₈	2.0x10 ¹³	0.0	28700 (83)
.CH ₃ C (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	3.0x10 ¹³	0.0	38000 (84)
.CH ₃ C (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ →.H+C ₆ H ₁₂	6.0x10 ¹³	0.0	39000 (85)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ =>.C ₂ H ₃ +C ₂ H ₄	2.0x10 ¹³	0.0	35500 (86)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ =>.H+C ₄ H ₆	3.2x10 ¹³	0.0	34800 (87)
.CH=CHCH ₂ CH ₃ =>.C ₂ H ₅ +C ₂ H ₂	2.0x10 ¹³	0.0	33000 (88)
.CH=CHCH ₂ CH ₃ =>.H+C ₄ H ₆ -1	4.0x10 ¹²	0.0	36500 (89)
.C ₃ H ₇ CO→.nC ₃ H ₇ +CO	2.8x10 ¹³	0.0	17150 (90)

Oxydations

.CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₄ H ₈ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (91)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (92)
.CH=CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₃ H ₇ CHO+ .CHO	4.6x10 ¹⁶	-1.39	1010 (93)
.CH ₂ =CCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →HCHO+ .C ₃ H ₇ CO	4.6x10 ¹⁶	-1.39	1010 (94)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	15165 (95)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	1.0x10 ¹²	0.0	22730 (96)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	2.6x10 ¹¹	0.0	5000 (97)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	6.9x10 ¹¹	0.0	5000 (98)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →1-PENTENE+ .OOH	6.9x10 ¹¹	0.0	5000 (99)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →2-PENTENE+ .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (100)
.CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →1-PENTENE+ .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (101)
.CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (102)
.CH ₃ CH ₂ CHCH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (103)
.CH ₂ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	4.5x10 ¹¹	0.0	5000 (104)
.C ₃ H ₇ CO+O ₂ →C ₃ H ₆ CO+ .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (105)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	1.0x10 ¹²	0.0	22730 (106)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	1.3x10 ¹²	0.0	15165 (107)
.CH ₃ CH=CHCH ₂ CH ₂ +O ₂ →C ₅ H ₈ + .OOH	2.6x10 ¹¹	0.0	5000 (108)
.CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₂ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (109)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	6.9x10 ¹¹	0.0	5000 (110)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (111)
.CH ₃ CH (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₂ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (112)
.C ₃ H ₆ CHO+O ₂ →C ₃ H ₅ CHO+ .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (113)
.CH ₃ C=CHCH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₂ H ₅ CHO+ .CH ₃ CO	4.6x10 ¹⁶	-1.39	1010 (114)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (115)
.CH ₃ CHCH ₂ CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	6.9x10 ¹¹	0.0	5000 (116)
.CH ₃ C (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.6x10 ¹²	0.0	5000 (117)
.CH ₃ C (CH ₃) CH ₂ CH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₆ H ₁₂ + .OOH	1.4x10 ¹²	0.0	5000 (118)
.iC ₄ H ₉ +O ₂ →iC ₄ H ₈ + .OOH	4.5x10 ¹¹	0.0	5000 (119)
.CH ₂ =CHCH ₂ CH ₂ +O ₂ →C ₄ H ₆ + .OOH	2.6x10 ¹¹	0.0	5000 (120)
.CH=CHCH ₂ CH ₃ +O ₂ →C ₂ H ₅ CHO+ .CHO	4.6x10 ¹⁶	-1.39	1010 (121)

Annexe II

Métathèses

.O.+1-PENTENE→.OH+.CH2=CHCH2CH2CH2	5.1x10 ¹³	0.0	7850	(122)
.O.+1-PENTENE→.OH+.CH=CHCH2CH2CH3	1.2x10 ¹¹	0.7	8960	(123)
.O.+1-PENTENE→.OH+.CH2=CCH2CH2CH3	6.0x10 ¹⁰	0.7	7630	(124)
.O.+1-PENTENE→.OH+.CH2=CHCHCH2CH3	8.8x10 ¹⁰	0.7	3250	(125)
.O.+1-PENTENE→.OH+.CH2=CHCH2CHCH3	2.6x10 ¹³	0.0	5200	(126)
1-PENTENE+.H→H2+.CH2=CHCH2CH2CH2	2.9x10 ⁷	2.0	7700	(127)
1-PENTENE+.H→H2+.CH=CHCH2CH2CH3	8.2x10 ⁵	2.5	12280	(128)
1-PENTENE+.H→H2+.CH2=CCH2CH2CH3	4.1x10 ⁵	2.5	9790	(129)
1-PENTENE+.H→H2+.CH2=CHCHCH2CH3	5.4x10 ⁴	2.5	-1900	(130)
1-PENTENE+.H→H2+.CH2=CHCH2CHCH3	9.0x10 ⁶	2.0	5000	(131)
1-PENTENE+.OH→H2O+.CH2=CHCH2CH2CH2	2.7x10 ⁶	2.0	450	(132)
1-PENTENE+.OH→H2O+.CH=CHCH2CH2CH3	2.2x10 ⁶	2.0	2780	(133)
1-PENTENE+.OH→H2O+.CH2=CCH2CH2CH3	1.1x10 ⁶	2.0	1450	(134)
1-PENTENE+.OH→H2O+.CH2=CHCHCH2CH3	3.0x10 ⁶	2.0	-1520	(135)
1-PENTENE+.OH→H2O+.CH2=CHCH2CHCH3	2.6x10 ⁶	2.0	-765	(136)
1-PENTENE+.OOH→H2O2+.CH2=CHCH2CH2CH2	6.0x10 ¹¹	0.0	17000	(137)
1-PENTENE+.OOH→H2O2+.CH2=CHCHCH2CH3	6.4x10 ³	2.6	12400	(138)
1-PENTENE+.OOH→H2O2+.CH2=CHCH2CHCH3	4.0x10 ¹¹	0.0	15500	(139)
1-PENTENE+.CH3→CH4+.CH2=CHCH2CH2CH2	3.0x10 ⁻¹	4.0	8200	(140)
1-PENTENE+.CH3→CH4+.CH=CHCH2CH2CH3	1.4	3.5	12900	(141)
1-PENTENE+.CH3→CH4+.CH2=CCH2CH2CH3	9.8x10 ⁻¹	3.5	11700	(142)
1-PENTENE+.CH3→CH4+.CH2=CHCHCH2CH3	1.0x10 ¹¹	0.0	7300	(143)
1-PENTENE+.CH3→CH4+.CH2=CHCH2CHCH3	2.0x10 ¹¹	0.0	9600	(144)
1-PENTENE+.C2H5→C2H6+.CH2=CHCH2CH2CH2	3.0x10 ¹¹	0.0	13500	(145)
1-PENTENE+.C2H5→C2H6+.CH2=CHCHCH2CH3	1.5	3.5	4140	(146)
1-PENTENE+.C2H5→C2H6+.CH2=CHCH2CHCH3	2.0x10 ¹¹	0.0	11000	(147)

Combinaisons

.H+.CH2=CHCHCH2CH3→1-PENTENE	0.5x10 ¹³	0.0	0.0	(148) ^a
.H+.CH2=CHCHCH2CH3→2-PENTENE	0.5x10 ¹³	0.0	0.0	(149) ^a
.H+.CH3CH=CHCHCH3=2-PENTENE	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(150)
.H+.CH2=CHCH2CH2CH2↔1-PENTENE	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(151)
.H+.CH=CHCH2CH2CH3↔1-PENTENE	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(152)
.H+.CH2=CCH2CH2CH3↔1-PENTENE	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(153)
.H+.CH2=CHCH2CHCH3↔1-PENTENE	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(154)
.H+.CH3CHCH2CH2CH3→C5H12	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(155)
.H+.CH2CH2CH2CH2CH3→C5H12	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(156)
.H+.CH3CH2CHCH2CH2CH3→C6H14	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(157)
.H+.CH2CH(CH3)CH2CH2CH3→C6H14	1.0x10 ¹⁴	0.0	0.0	(158)
.OH+.CH2=CHCHCH2CH3→C5H9OH	3.0x10 ¹²	0.0	0.0	(159) ^a
.OH+.CH3CH=CHCHCH3→C5H9OH	3.0x10 ¹²	0.0	0.0	(160) ^a
.OOH+.CH2=CHCHCH2CH3→C5H9OOH	1.0x10 ¹⁵	-0.8	0.0	(161) ^a
.OOH+.CH3CH=CHCHCH3→C5H9OOH	1.0x10 ¹⁵	-0.8	0.0	(162) ^a
.CH3+.CH2=CHCHCH2CH3→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(163) ^a
.CH3+.CH3CH=CHCHCH3→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(164) ^a
.CH3+.CH2=CHCH2CH2CH2→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(165) ^a
.CH3+.CH=CHCH2CH2CH3→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(166) ^a
.CH3+.CH2=CCH2CH2CH3→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(167) ^a
.CH3+.CH2=CHCH2CHCH3→C6H12	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(168) ^a
.CH3+.CH3CHCH2CH2CH3→C6H14	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(169) ^a
.CH3+.CH2CH2CH2CH2CH3→C6H14	2.0x10 ¹³	0.0	0.0	(170) ^a
.C2H5+.CH2=CHCHCH2CH3→C7H14	2.6x10 ¹²	0.0	0.0	(171) ^a
.C2H5+.CH3CH=CHCHCH3→C7H14	2.6x10 ¹²	0.0	0.0	(172) ^a
.CH3CH=CHCHCH3+.CH3CH=CHCHCH3→C10H18	9.9x10 ¹¹	0.0	0.0	(173) ^a
.CH2=CHCHCH2CH3+.CH2=CHCHCH2CH3→C10H18	9.9x10 ¹¹	0.0	0.0	(174) ^a
.CH2=CHCHCH2CH3+.CH3CH=CHCHCH3→C10H18	9.9x10 ¹¹	0.0	0.0	(175) ^a
.CH2=CHCHCH2CH3+.iC3H7→C8H16	2.3x10 ¹²	0.0	0.0	(176) ^a
.CH3CH=CHCHCH3+.iC3H7→C8H16	2.3x10 ¹²	0.0	0.0	(177) ^a

Dismutations

2-PENTENE+O2↔.CH2=CHCHCH2CH3+.OOH	2.1x10 ¹²	0.0	38360	(178)
2-PENTENE+O2↔.CH3CH=CHCHCH3+.OOH	1.4x10 ¹²	0.0	35330	(179)

Notes :

^a : Rate constant calculated using KINGAS [20].

^b : Rate constant taken from Tsang [21].

ANNEXE III

TABLES ET FIGURES

Figure A-III-1 : Conversion du **propène** en réacteur fermé à $P= 80$ kPa et $T= 626$ K pour $\phi = 2,0$ et $0,8$ (Wilk et al.,1989).

Figure A-III-2 : Conversion du **propène** en réacteur fermé à richesse $\phi = 0,8$, $P= 80$ kPa pour $T= 678$ et 715 K (Wilk et al.,1989).

Figure A-III-3 : Délais d'auto-inflammation du **1-pentène** en fonction de la température au point mort haut en machine à compression rapide, à $\phi = 1$, pour une fraction molaire d'hydrocarbure de $2,73$ % et une pression au point mort haut P_{PMH} de 680 à 920 kPa.

Figure A-III-4 : Analyse des flux de consommation du **1-pentène** après la flamme froide

Figure A-III-5 : Conversion du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa pour trois températures 654 , 676 et 716 K et pour une richesse de $0,4$ (Prabhu et al., 1996).

Figure A-III-6 : Profils de concentration de CO et H₂O en réacteur piston à 800 kPa pour trois températures 654 , 676 et 716 K et pour une richesse de $0,4$ (Prabhu et al., 1996).

Figure A-III-7 : Profils de concentration de l'acroléine et de la 2,4-pentadione à 800 kPa pour trois températures 654 , 676 et 716 K et pour une richesse de $0,4$ (Prabhu et al., 1996).

Figure A-III-8 : Profils de concentration du butadiène et du pentadiène en réacteur piston à 800 kPa, pour trois températures 654 , 676 et 716 K et pour une richesse de $0,4$ (Prabhu et al., 1996).

Figure A-III-9 : Profils de concentration du butanal et de l'éthylène en réacteur piston à 800 kPa, pour trois températures 654 , 676 et 716 K pour une richesse de $0,4$ (Prabhu et al., 1996).

Figure A-III-10 : Délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en machine à compression rapide à $\phi = 1$ pour des pressions avant compression de 58 , 67 et 75 kPa correspondant à des pressions moyennes après compression de 740 , 915 et 1250 kPa (Vanhove, 2004).

Figure A-III-11 : Analyse de flux de consommation du **1-hexène** à 20 % de consommation $T_{PHM} = 724$ K, $T_{analyse} = 800$ K.

Figure A-III-12 : Analyses de sensibilité des constantes de vitesse des principaux processus élémentaires d'oxydation à basse température du **1-hexène** (a) et du **n-heptane** (b) (Buda et al.,2005).

Figure A-III-13 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 930 K, 5 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

Figure A-III-14 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 1010 K, 1 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

Figure A-III-15 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 1010 K, 10 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

Figure A-III-16 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-pentène** en tube à onde de choc en fonction de la température après passage de l'onde réfléchiée, pour trois richesses différentes et une concentration en hydrocarbure de 1% (Buda et al., 2005).

Figure A-III-17 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en tube à onde de choc, à basse pression (~210 kPa), pour trois richesses différentes et à 0,1 % de concentration en hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2005).

Figure A-III-18 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en tube à onde de choc, à haute pression (~1011 kPa), pour trois richesses différentes et à 0,1 % de concentration en hydrocarbure.(Yahyaoui et al., 2003).

Figure A-III-19 : Analyse de flux à 50 % de consommation du **1-hexène** et 1300 K.

Figure A-III-20 : Analyse de flux à 50 % de consommation du **1-hexène** et 1750 K.

Figure A-III-21 : Profils de concentration des produits de combustion du **1-hexène** en tube à onde de choc à basse pression(P=200 kPa), à $\phi = 1$ et à 1300 et 1750 K.

Figure A-III-22 : Analyse de sensibilité des réactions de consommation du **1-hexène** en tube à onde de choc à $\phi = 1$ et 0,1% de concentration en hydrocarbure .

Figure A-III-23 : Comparaison des délais d'auto-inflammation simulés du **1-butène**, du **1-pentène** et du **1-hexène** pour une richesse de 1, une concentration en hydrocarbure de 1 % et une pression moyenne de 8,5 kPa.

Figure A-III-24 : Délais d'auto-inflammation de **l'iso-octane** en machine à compression pour une richesse de 1 et pour des pressions moyennes après compression de 1290 et 1430 kPa (Buda et al., 2005).

Figure A-III-25 : Evolution des délais d'auto-inflammation de **l'iso-octane** en tube à onde de choc, à basse pression (~210 kPa), pour une concentration en hydrocarbure de 0,1 % et pour trois richesses différentes (Yahyaoui et al., 2002).

Figure A-III-26 : Délais d'auto-inflammation de **l'iso-octane** en tube à onde de choc et à haute pression (~1033 kPa), pour trois richesses différentes (0,5 ;1,0 ;1,5), pour une concentration d'hydrocarbure de 0,1 % (Yahyaoui et al., 2002).

Figure A-III-27 : Analyse des voies de consommation de **l'iso-octane** pur à 20 % de conversion du réactif et 1368 K.

Figure A-III-28 : Analyse des voies de consommation de **l'iso-octane** pur à 20 % de conversion du réactif et 1715 K.

Figure A-III-29 : Profils de concentration des produits de combustion de **l'iso-octane** à 1368 et 1715 K.

Figure A-III-30 : Profils de concentration des produits de combustion de **l'iso-octane** à 1368K.

Figure A-III-31 : Délais d'auto-inflammation du **toluène** en tube à onde de choc pour une pression de 110 kPa, pour trois richesses différentes (0,5 ;1,0 ;1,5), pour une concentration d'hydrocarbure de 0,4 % (Pengloan, 2001).

Figure A-III-32 : Délais d'auto-inflammation du mélange stœchiométrique **1-hexène/iso-octane** 18/82 en machine à compression rapide pour des pressions moyennes après compression de 940, 1160 et 1320 kPa (Vanhove, 2004).

Figure A-III-33 : Comparaison à concentration en carbone initial constante des délais expérimentaux et simulés en machine à compression rapide pour le 1-hexène (2,28 % en concentration d'hydrocarbure), l'iso-octane (1,65 % en concentration d'hydrocarbure) et le mélange 1-hexène/iso-octane 18/82 (1,74 % en concentration d'hydrocarbure). (Minetti, 1998 ; Vanhove, 2004).

Figure A-III-34 : Analyse de sensibilité des constantes cinétiques des processus élémentaires du mécanisme primaire et des décompositions des hydroperoxydes pour l'oxydation du mélange **1-hexène/iso-octane** 18/82, à trois températures situées avant (650 K), dans (748 K) et après (836 K) la zone du coefficient négatif de température.

Figure A-III-35 : Analyse des flux de consommation de **l'iso-octane**, pour le mélange stœchiométrique 1-hexène/iso-octane 18/82 après la flamme froide à $T_{\text{analyse}} = 857$ K, avec $T_{\text{PMH}} = 707$ K et $P_{\text{PMH}} = 1350$ kPa, et une concentration initiale en hydrocarbure de 1,74 %

Figure A-III-36 : Analyse des flux de consommation du 1-hexène, pour le mélange stœchiométrique 1-hexène/iso-octane 18/82 après la flamme froide à $T_{\text{analyse}} = 857$ K, avec $T_{\text{PMH}} = 707$ K et $P_{\text{PMH}} = 1350$ kPa, et une concentration initiale en hydrocarbure de 1,74 %

Figure A-III-37 : Délais d'auto-inflammation de mélanges **1-hexène/iso-octane** pour une pression moyenne de 210 kPa et une richesse de 1 (Yahyaoui et al., 2004).

Figure A-III-38 : Analyse des voies de consommation de **l'iso-octane** dans le mélange **iso-octane/1-hexène** 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C_8 et à 1368 K.

Figure A-III-39 : Analyse des voies de consommation du **1-hexène** dans le mélange **iso-octane/1-hexène** 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C_6 et à 1368 K.

Figure A-III-40 : Analyse des voies de consommation de **l'iso-octane** dans le mélange **iso-octane/1-hexène** 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C_8 et à 1707 K.

Figure A-III-41 : Analyse des voies de consommation du **1-hexène** dans le mélange **iso-octane/1-hexène** 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C₆ et à 1707 K.

Figure A-III-42 : Profil de concentration des produits de combustion du mélange **1-hexène/iso-octane** 50/50 à 1368 et 1707 K.

Figure A-III-43 : Délais d'auto-inflammation de mélanges **iso-octane/toluène** à richesse 1 et 0,2 % en concentration d'hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2002).

Figure A-III-44 : Profils de concentration des produits de combustion du mélange **iso-octane/toluène** 50/50 à 1507 et 1786 K.

Figure A-III-45 : Délais d'auto-inflammation de mélanges **toluène/1-hexène** à richesse $\varphi = 1$ et 0,2 % en concentration d'hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2002).

Figure A-III-46 : Profils de concentration des produits de combustion du mélange **toluène/1-hexène** 50/50 à 1360 et 1744 K.

Figure A-III-47 : Délais d'auto-inflammation du mélange stœchiométrique **iso-octane/toluène/1-hexène** 50/35/15, pour une concentration en hydrocarbure de 0,2% et une pression moyenne $P = 210$ kPa (Yahyaoui et al., 2002). Comparaison avec les délais simulés pour les produits purs dans les mêmes conditions de richesse et de concentration en hydrocarbure.

Figure A-III-48 : Profils de concentration des réactifs en fonction du temps pour le mélange **iso-octane/toluène/1-hexène** 50/35/15 à 1493 et 1802 K.

Figure A-III-49 : Analyse des flux de consommation du **toluène** à 1493 K dans le mélange ternaire.

Figure A-III-50 : Analyse des flux de consommation du **toluène** à 1719 K dans le mélange ternaire.

Figure A-III-51 : Analyse des flux de consommation du **1-hexène** à 1483 K dans le mélange ternaire.

Figure A-III-52 : Analyse des flux de consommation du **1-hexène** à 1719 K dans le mélange ternaire.

Figure A-III-53 : Analyse des flux de consommation de **l'iso-octane** à 1483 K dans le mélange ternaire.

Figure A-III-54 : Analyse des flux de consommation de **l'iso-octane** à 1719 K dans le mélange ternaire.

Tableau A-III-1 : Analyse comparative des produits de combustion du **1-pentène** après la flamme froide à 20% de conversion, $T_{PMH} = 735 \text{ K}$, $T_{analyse} = 800 \text{ K}$, $P_{PMH} = 707 \text{ kPa}$.

Tableau A-III-2 : Sélectivités des produits d'oxydation du **1-hexène** après la flamme froide pour une température et une pression au point mort haut de 707 K et 700 kPa, et pour une conversion du réactif calculée égale à 56% (*Vanhove, 2004*).

Tableau A-III-3 : Comparaison des sélectivités expérimentales et calculées des produits d'oxydation du mélange **1-hexène/iso-octane** 18/82 après la flamme froide pour une température au point mort haut de 707 K, une conversion calculée de 22 % en 1-hexène et de 57 % en iso-octane (*Vanhove, 2004*).

Note sur les analyses de flux

Les pourcentages associés aux flèches se réfèrent au flux global de décomposition d'un espèce donnée et non au flux global de décomposition du réactif initial

COMBUSTION DES ALCENES A BASSE TEMPERATURE

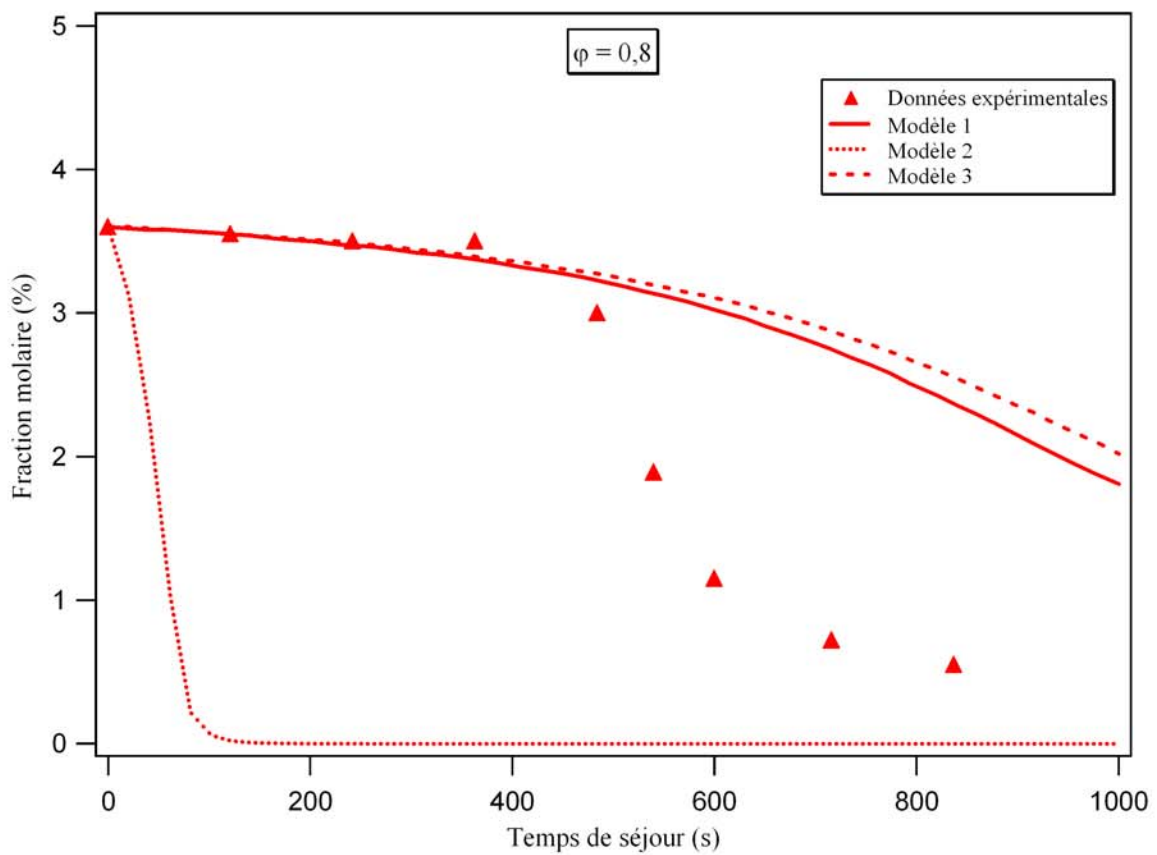
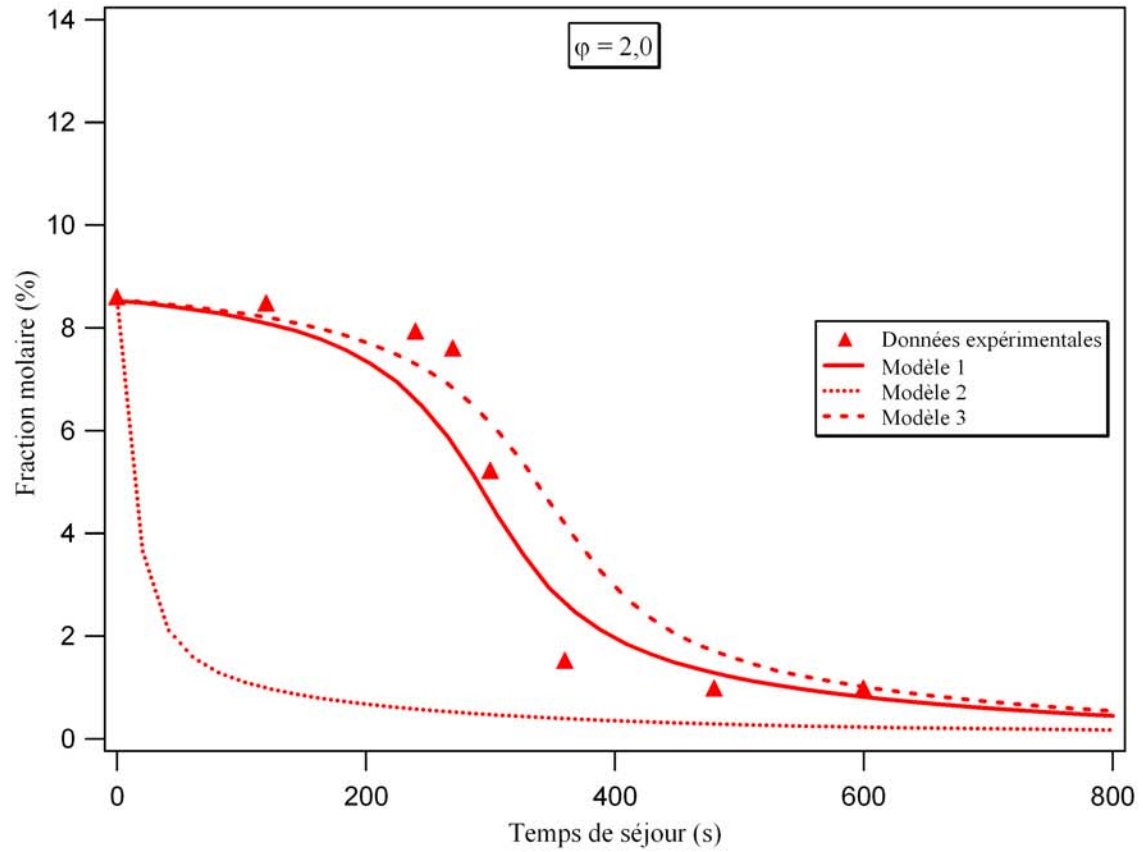


Figure A-III-1 : Conversion du **propène** en réacteur fermé à $P = 80 \text{ kPa}$ et $T = 626 \text{ K}$ pour $\varphi = 2,0$ et $0,8$ (Wilk et al., 1989).

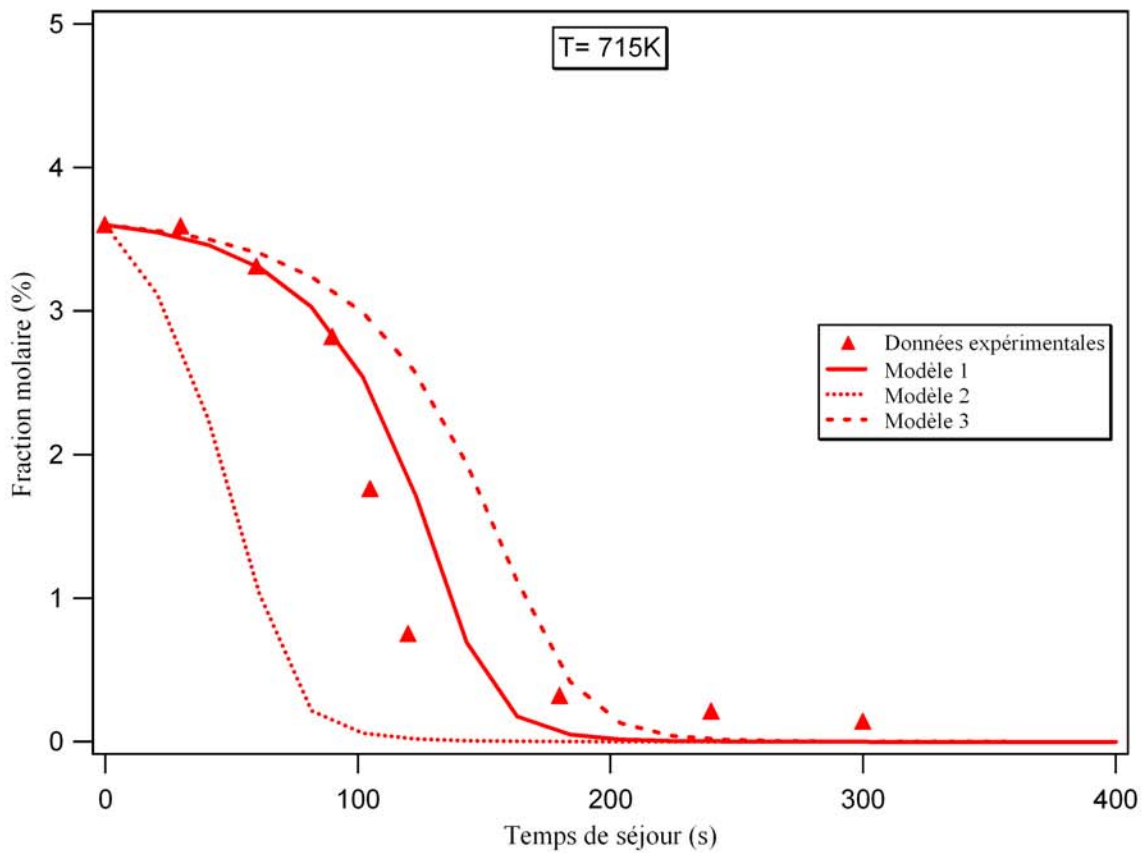
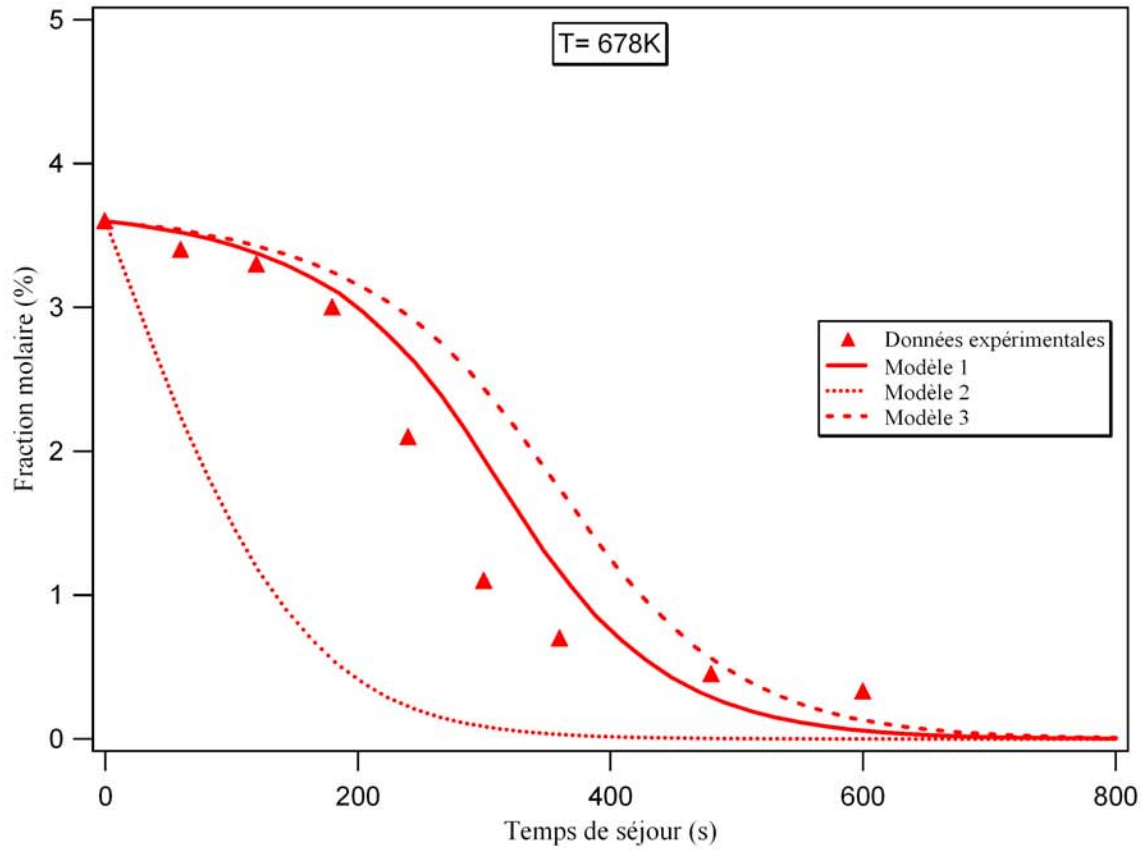


Figure A-III-2 : Conversion du **propène** en réacteur fermé à richesse $\phi = 0,8$, $P = 80$ kPa pour $T = 678$ et 715 K (Wilk et al., 1989).

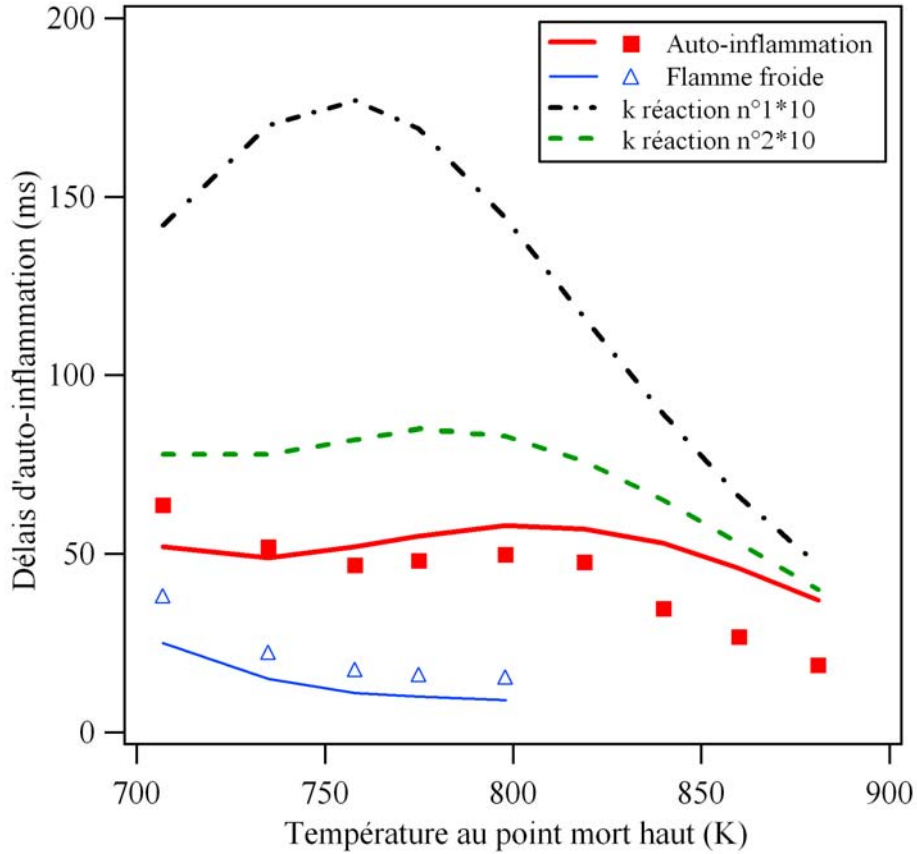


Figure A-III-3 : Délais d'auto-inflammation du **1-pentène** en fonction de la température au point mort haut en machine à compression rapide, à $\varphi = 1$, pour une fraction molaire d'hydrocarbure de 2,73 % et une pression au point mort haut P_{PMH} de 680 à 920 kPa.

Tableau A-III-1 : Analyse comparative des produits de combustion du 1-pentène après la flamme froide à 20% de conversion, $T_{PMH} = 735 \text{ K}$, $T_{analyse} = 800 \text{ K}$, $P_{PMH} = 707 \text{ kPa}$.

	Machine à compression rapide	Simulation
Produits primaires		
1,3-Pentadiène	3,9	7,0
2-Propyloxirane	2,7	1,5
2,4-Diméthyl-oxetane	0,4	0,1
2-Méthyl-tétrahydrofurane	0,3	0,4
Pentanal + 2-pentanone	2	9,5
Ethers avec une fonction alcool	-	4,2
Ethers cycliques insaturés	-	20,2
Cyclopentène	0,4	0,4
Butanal	7,4	2,1
Produits secondaires		
1,3-Butadiène	3,9	3,0
2-Butèneal	0,8	3,3
Acroléine	13,0	8,5
Propanal	0,8	0,3
Produits de la base C₀-C₂		
Ethanal	29,6	22,2
Ethylène	25,2	17,7
Formaldéhyde	-	36,1
Monoxyde de carbone	64,1	23,5

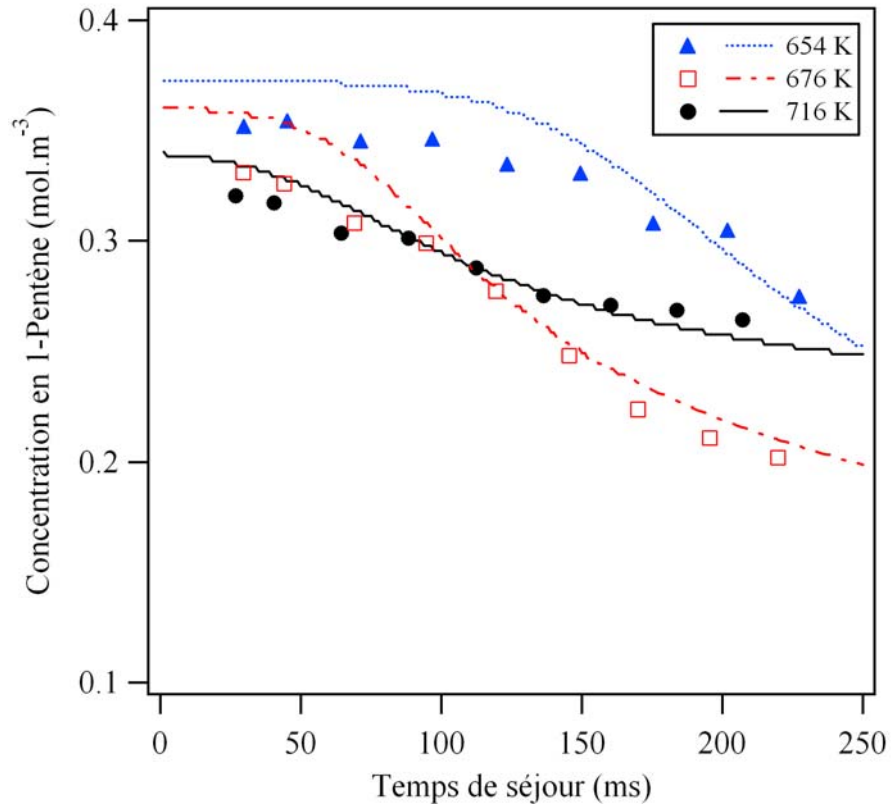


Figure A-III-5 : Conversion du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa pour trois températures 654, 676 et 716 K et pour une richesse de 0,4 (Prabhu et al., 1996).

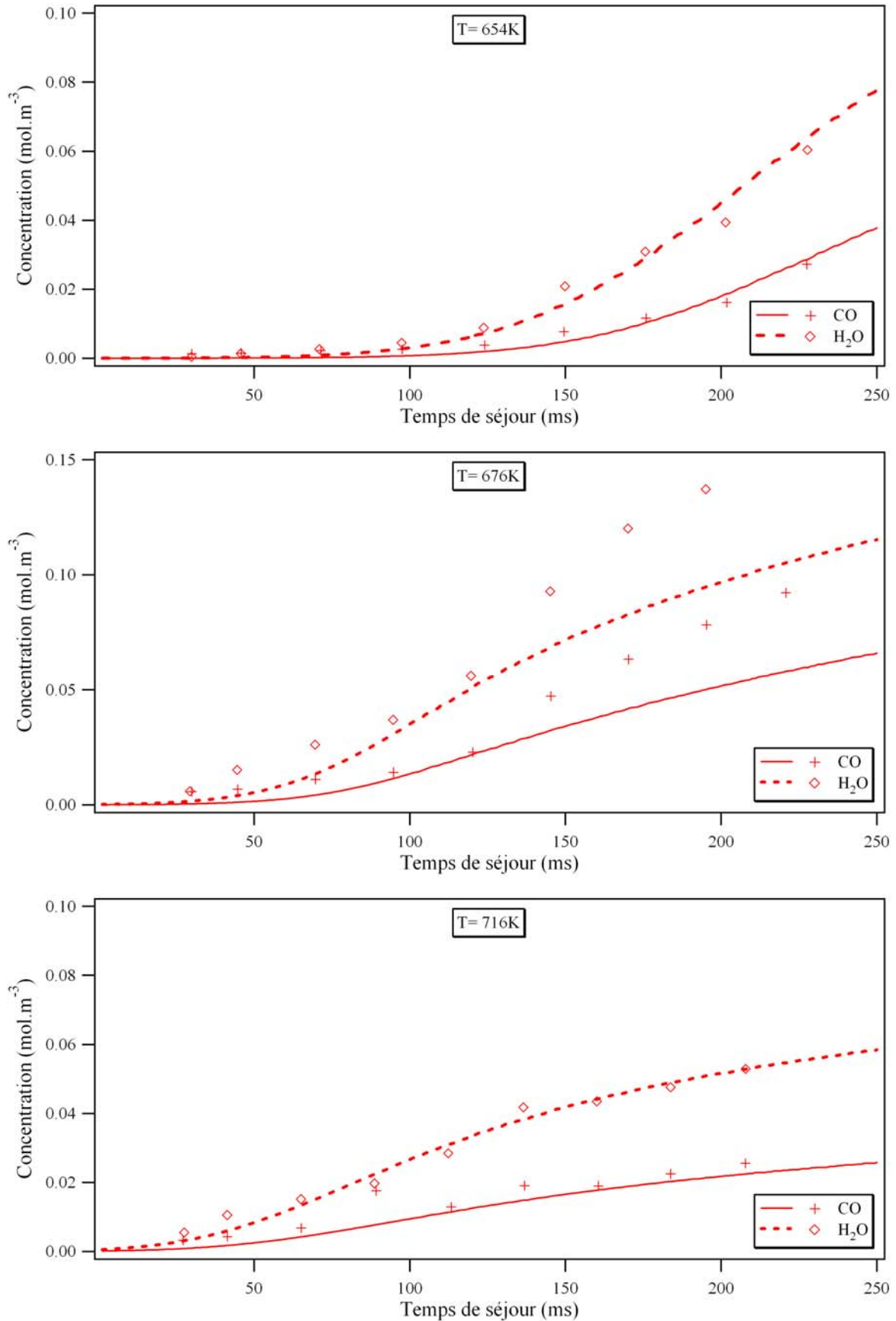


Figure A-III-6 : Profils de concentration de CO et H₂O pour l'oxydation du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa pour trois températures 654, 676 et 716 K et pour une richesse de 0,4 (Prabhu et al., 1996).

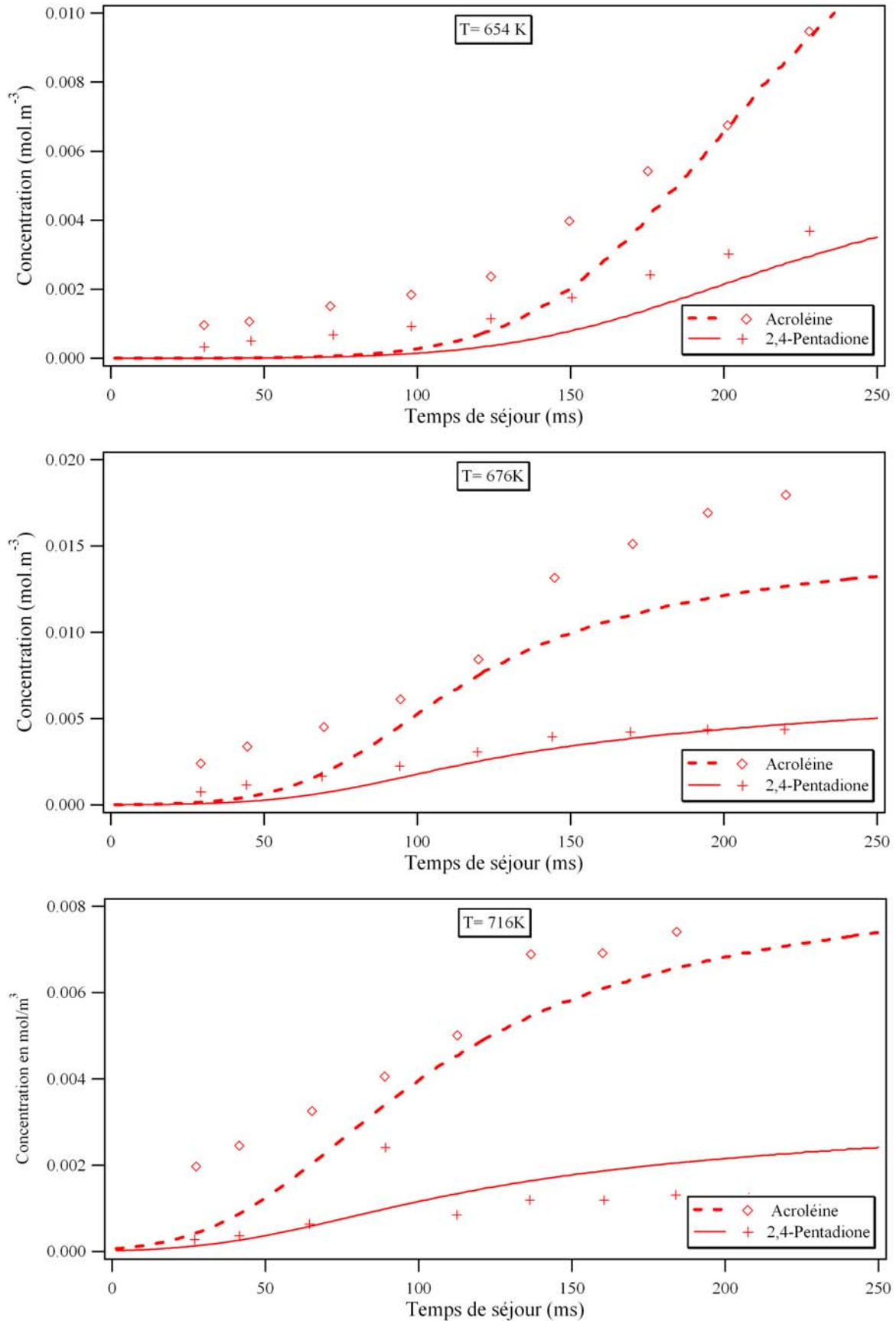


Figure A-III-7 : Profils de concentration de l'acroléine et de la 2,4-pentadione pour l'oxydation du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa pour trois températures 654, 676 et 716 K et pour une richesse de 0,4 (Prabhu et al., 1996).

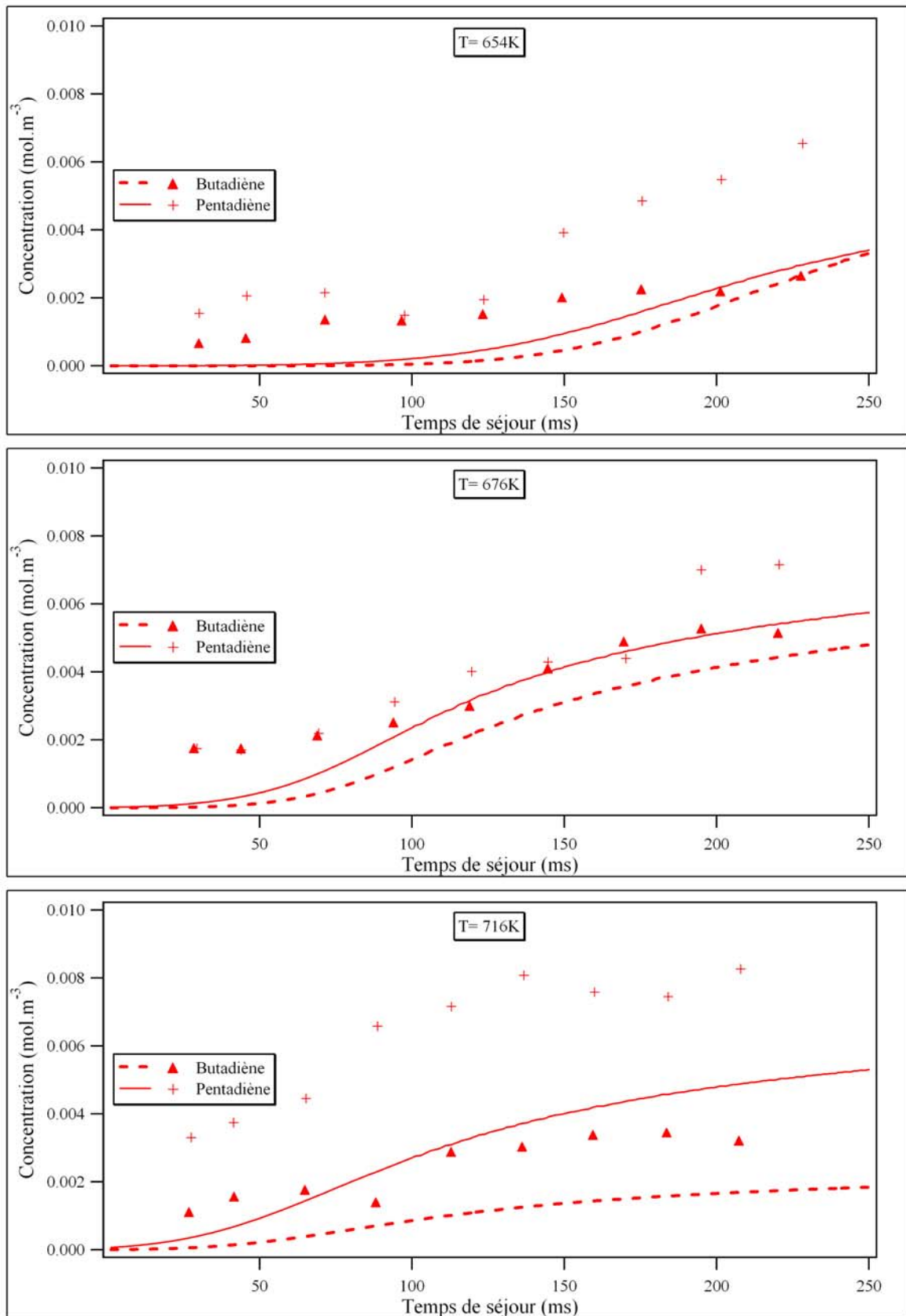


Figure A-III-8 : Profils de concentration du butadiène et du pentadiène pour l'oxydation du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa, pour trois températures 654, 676 et 716 K et pour une richesse de 0,4 (Prabhu et al., 1996).

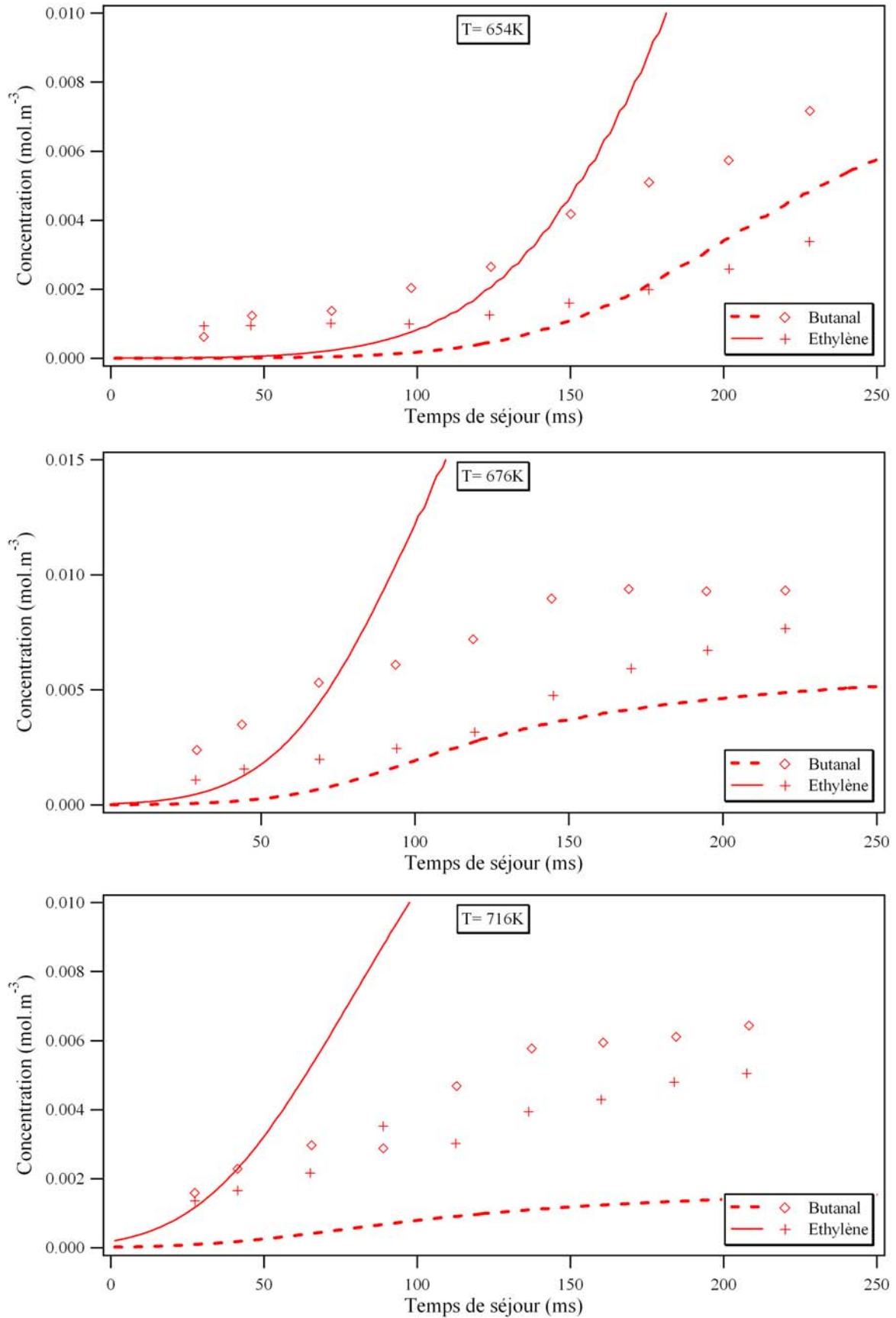


Figure A-III-9 : Profils de concentration du butanal et de l'éthylène pour l'oxydation du **1-pentène** en réacteur piston à 800 kPa, pour trois températures 654, 676 et 716 K pour une richesse de 0,4 (Prabhu et al., 1996).

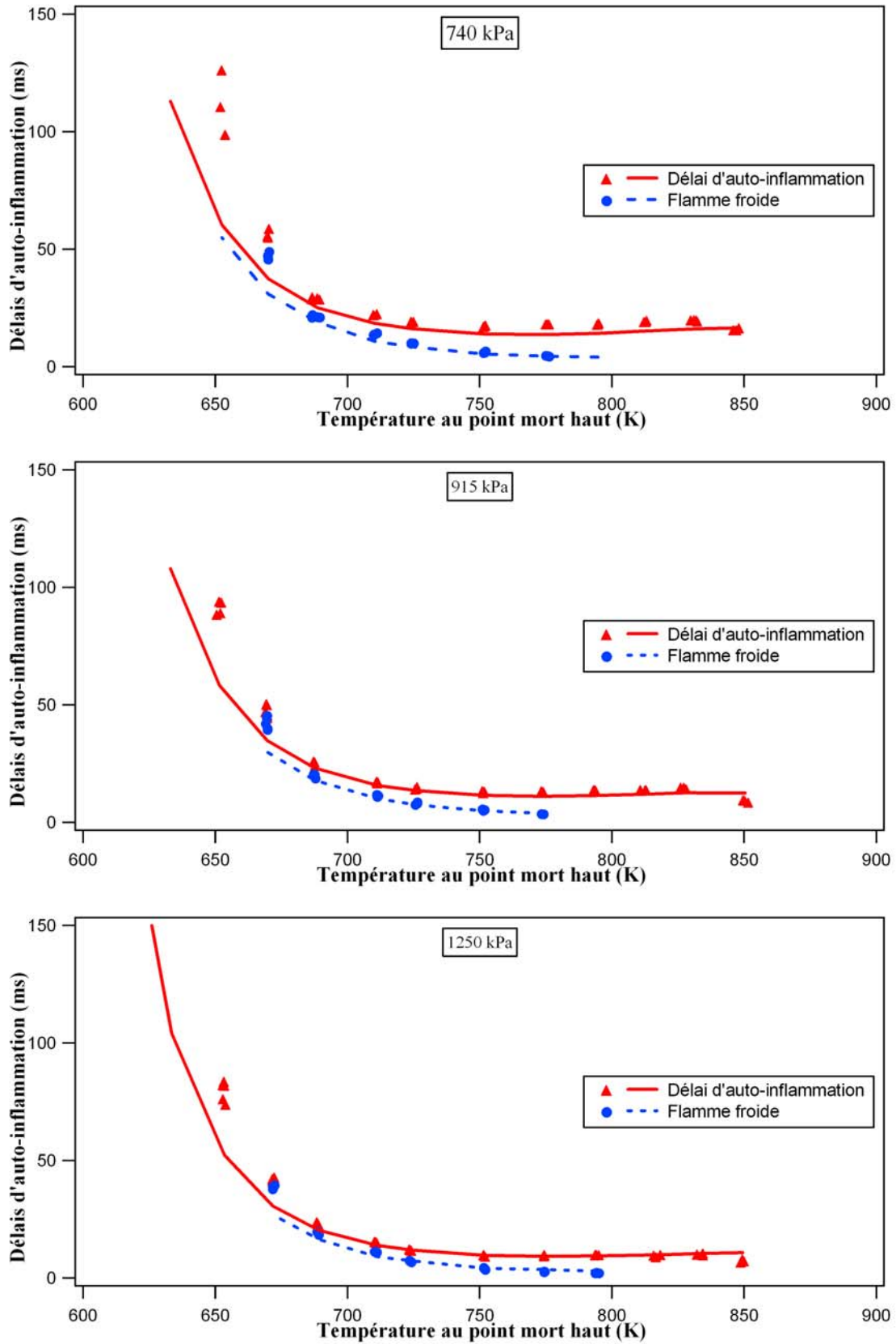


Figure A-III-10 : Délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en machine à compression rapide à $\phi = 1$ pour des pressions avant compression de 58, 67 et 75 kPa correspondant à des pressions moyennes après compression de 740, 915 et 1250 kPa (Vanhove, 2004).

Tableau A-III-2 : Sélectivités des produits d'oxydation du 1-hexène après la flamme froide pour une température et une pression au point mort haut de 707 K et 700 kPa, et pour une conversion du réactif calculée égale à 56% (Vanhove, 2004).

	Sélectivité expérimentale	Sélectivité simulée
Produits Primaires		
Hexadiènes	4,9	5,2
Butyloxirane	2,4	0,6
2,4-Diméthyl-THF	1,9	0,6
Hexènal	0,8	0,02
Hexanal	1,0	3,2
2-Hexanone	0,8	4,4
Ethers avec OH	-	5,8
Total Ethers insaturés	5,9	30,1
<i>dont</i>		
<i>Méthyl-Vinyl-oxétane</i>	2,4	0,1
<i>2-Vinyl-THF</i>	2,3	0,5
<i>2-Ethyl-2,5-dihydrofurane</i>	1,2	21,9
<i>Total cycle à 6</i>	-	6,4
Pentanal	10,5	1
Produits secondaires		
Pentènal	2,3	0,2
Pentadiènes	0,1	0,1
Butène	5,6	0,4
Butadiène	5,4	0,3
Propène	7,3	5,2
Propanal	13,0	2,2
Acroléine	9,7	8,2
Produits de la base C₀-C₂		
Ethanal	8,9	3,0
Ethylène	7,5	6,8
Formaldéhyde	-	4,3
CO	1,2	5,8

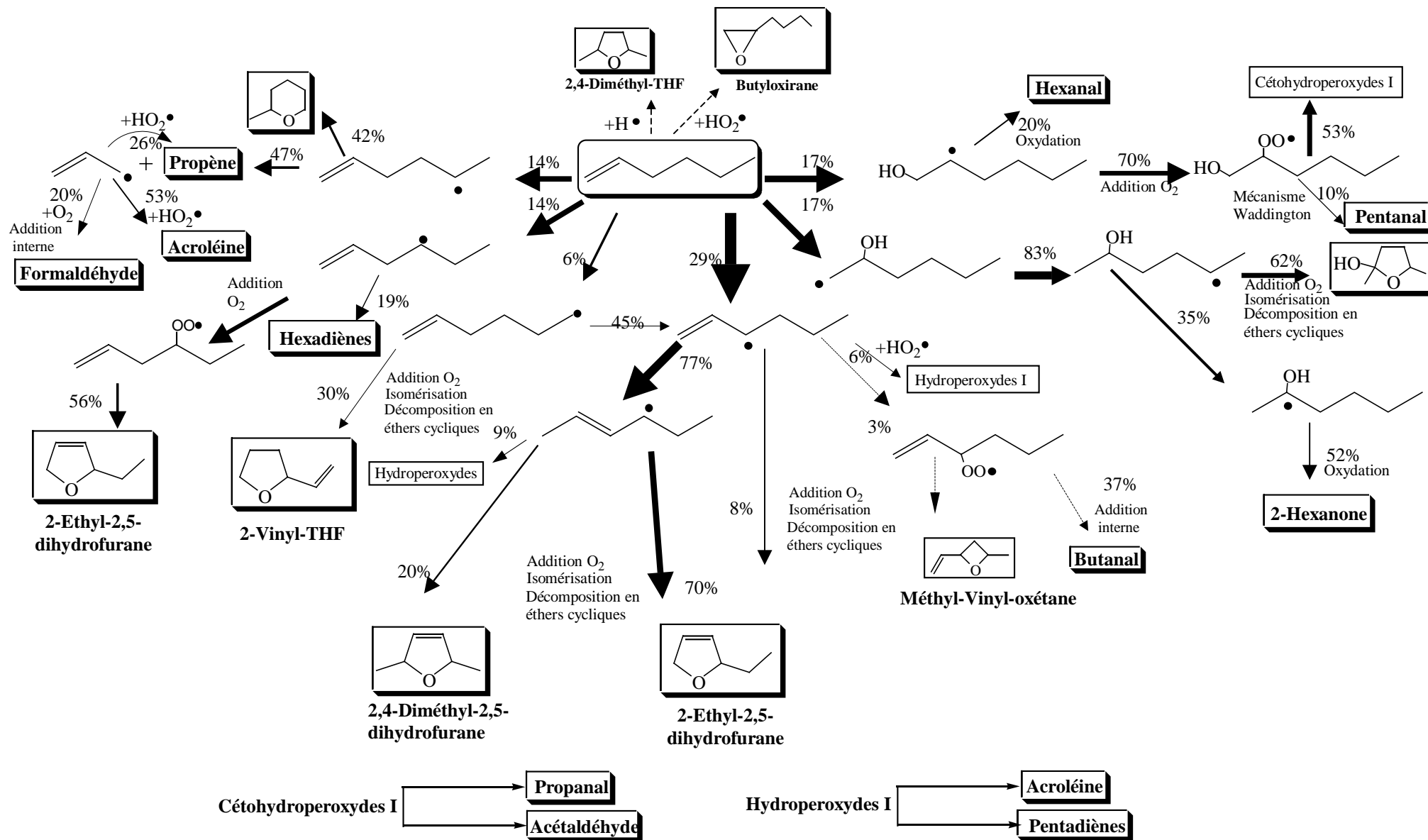


Figure A-III-11 : Analyse de flux de consommation du 1-hexène à 20 % de consommation $T_{PHM} = 724 \text{ K}$, $T_{analyse} = 800 \text{ K}$.

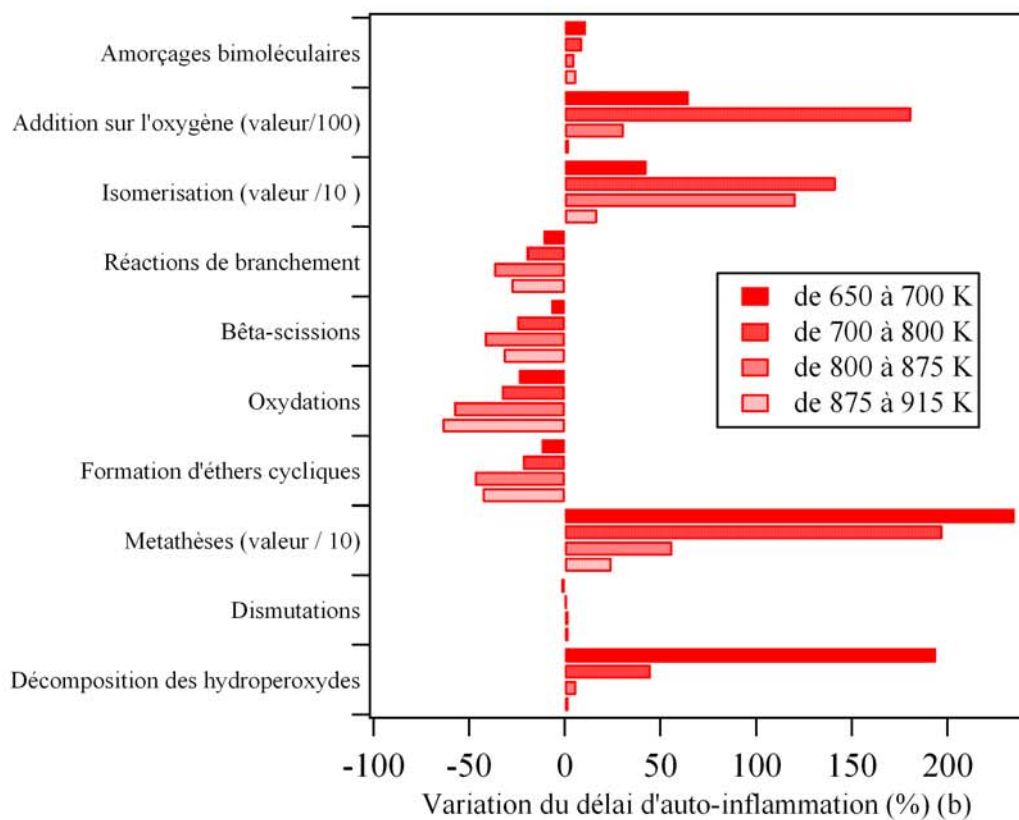
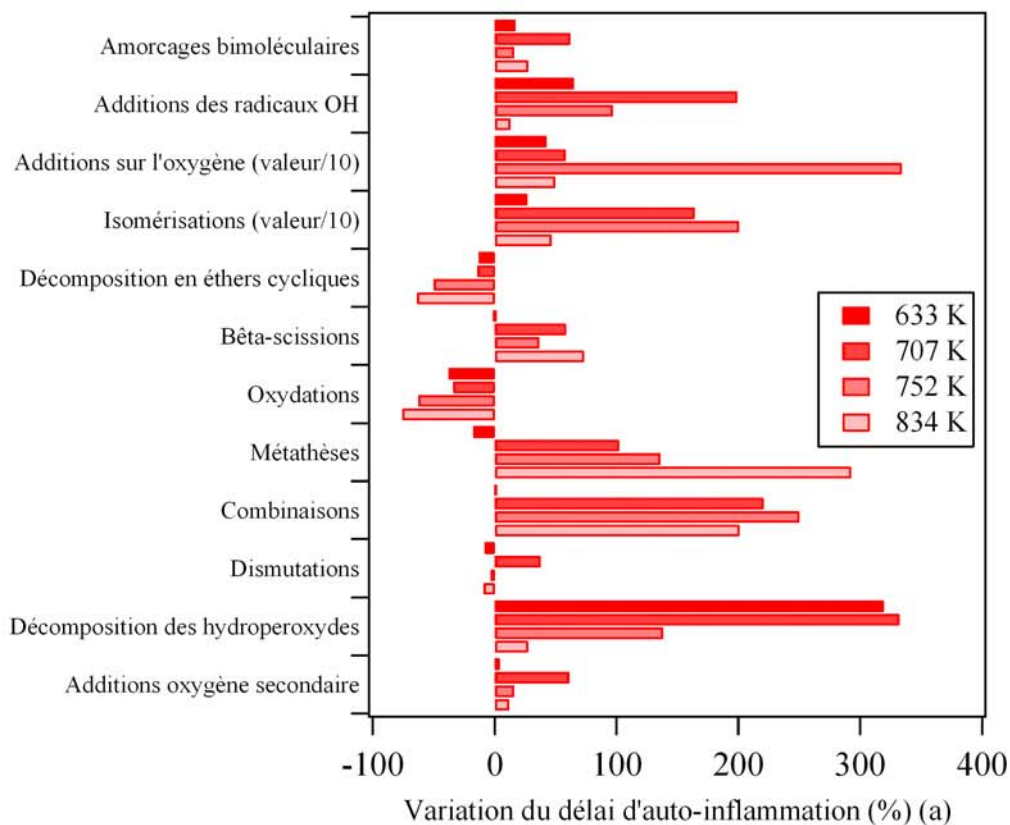


Figure A-III-12 : Analyses de sensibilité des constantes de vitesse des principaux processus élémentaires d'oxydation à basse température du **1-hexène** (a) et du **n-heptane** (b) (Buda et al.,2005).

COMBUSTION DES ALCENES A HAUTES TEMPERATURES

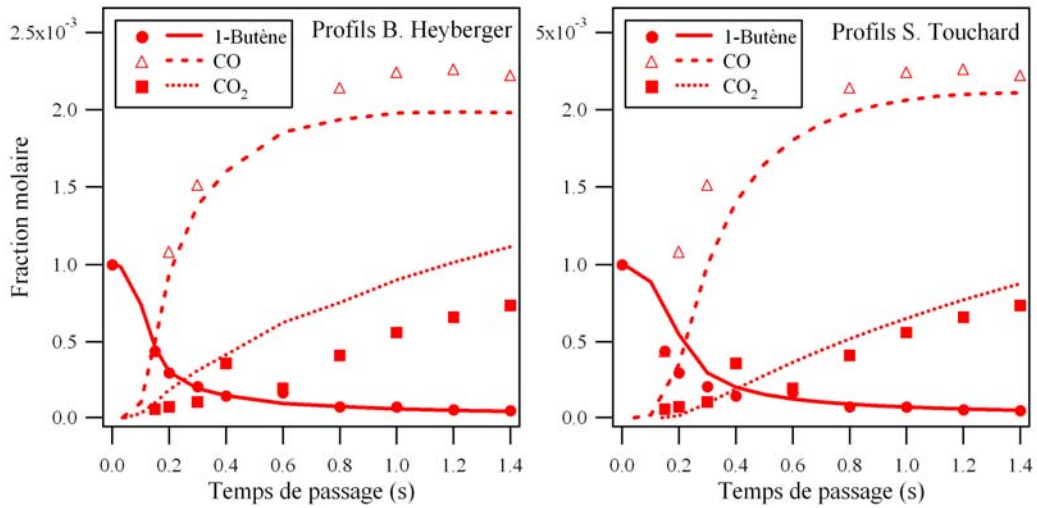


Figure A-III-13 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 930 K, 5 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

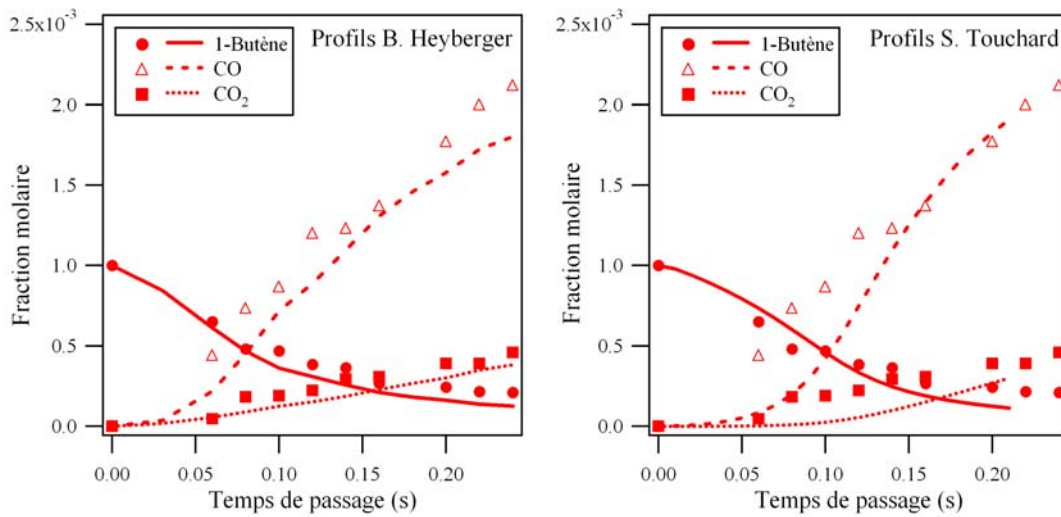


Figure A-III-14 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 1010 K, 1 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

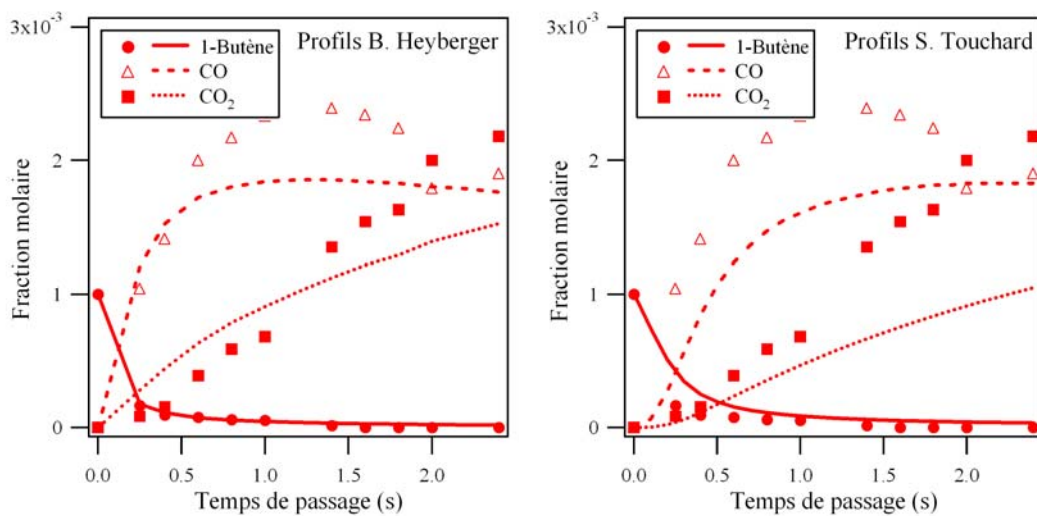


Figure A-III-15 : Profils des produits de la combustion du **1-butène** à 1010 K, 10 atm, $\phi = 0,1$ (Chakir et al., 1988).

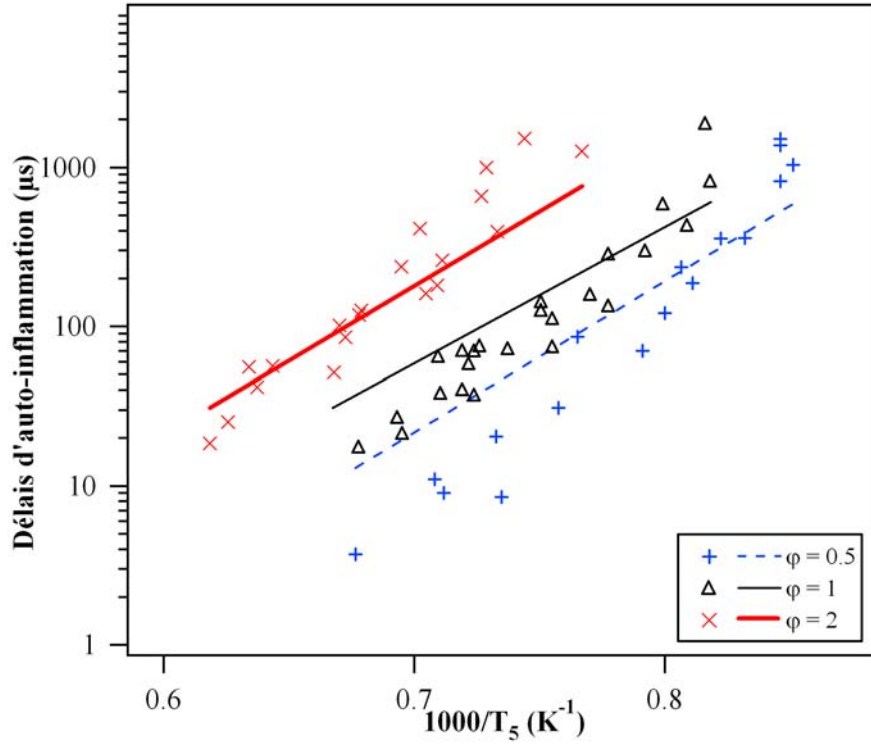


Figure A-III-16 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-pentène** en tube à onde de choc en fonction de la température après passage de l'onde réfléchie, pour trois richesses différentes et une concentration en hydrocarbure de 1% (Buda et al., 2005).

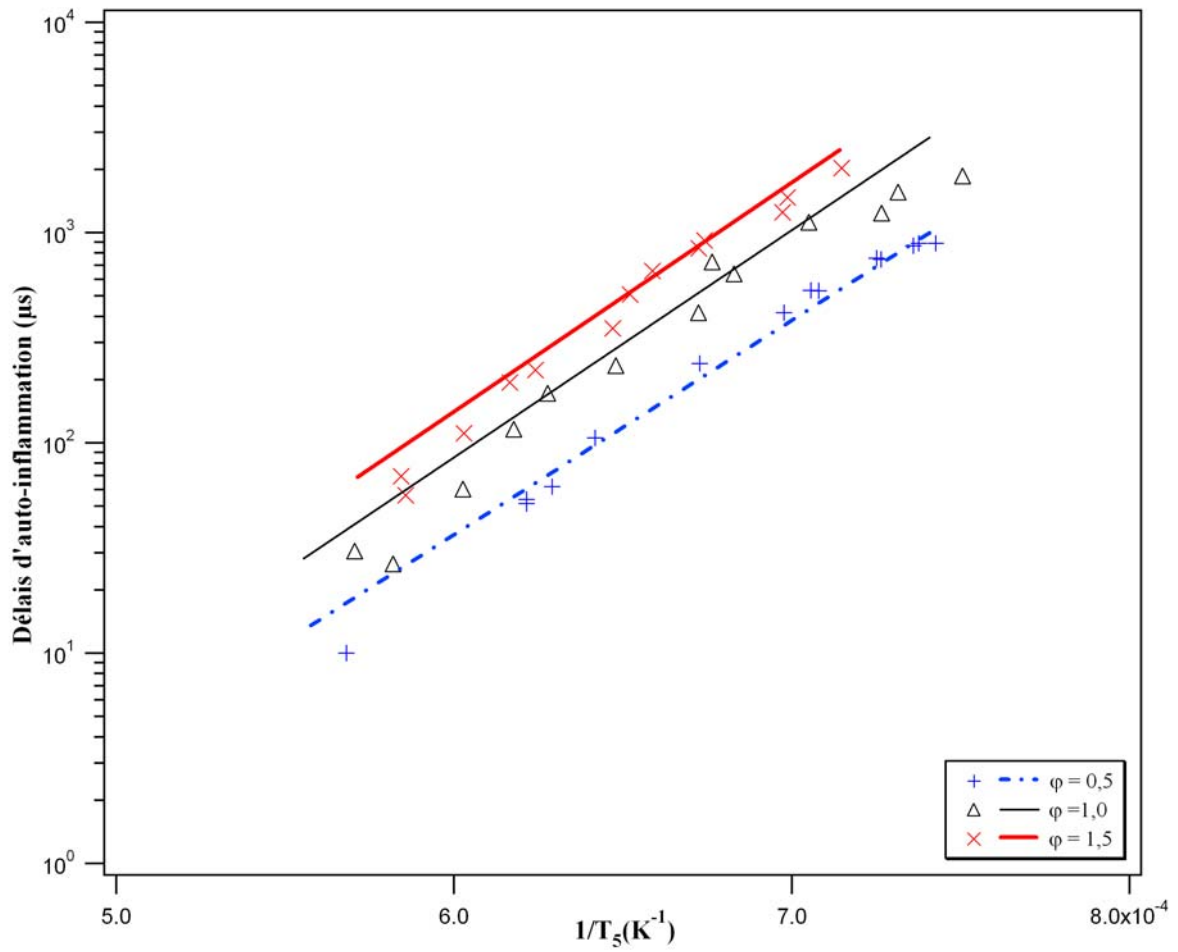


Figure A-III-17 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en tube à onde de choc, à basse pression (~ 210 kPa), pour trois richesses différentes et à 0,1 % de concentration en hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2005).

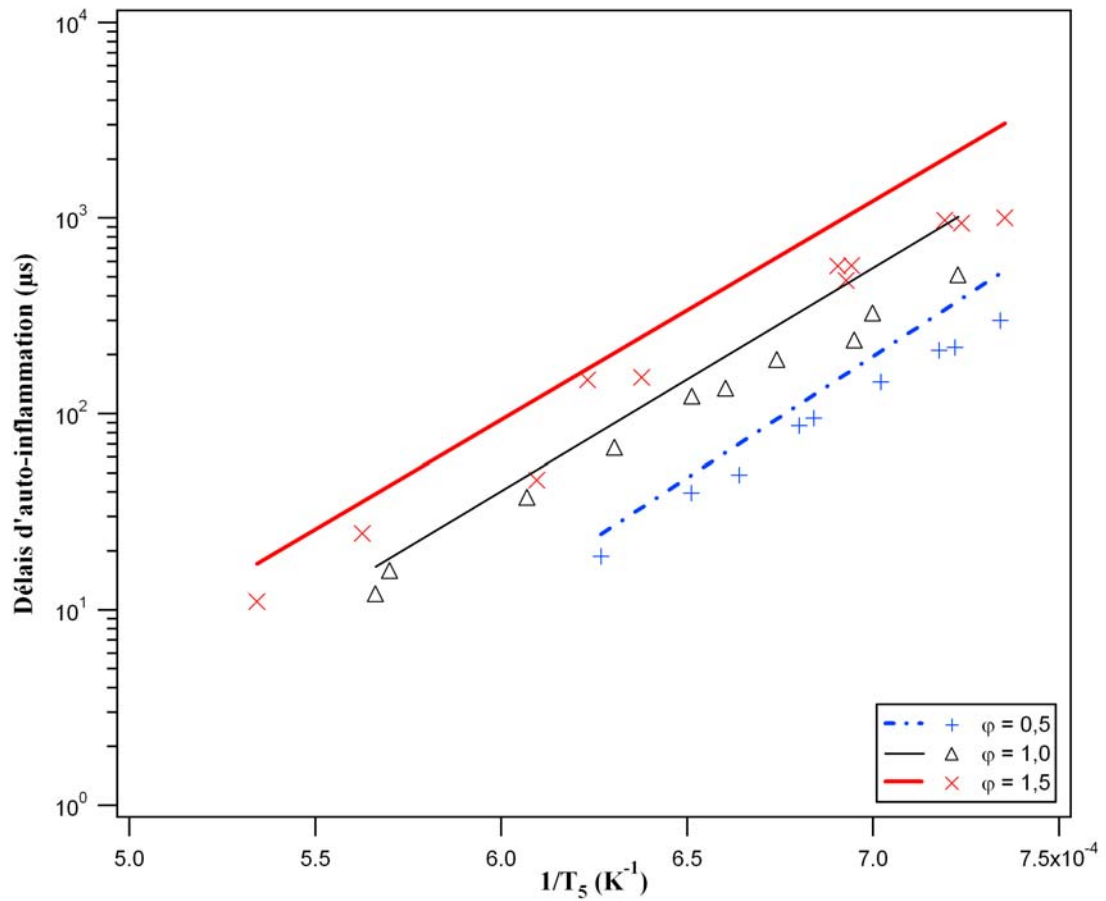


Figure A-III-18 : Evolution des délais d'auto-inflammation du **1-hexène** en tube à onde de choc, à haute pression (~ 1011 kPa), pour trois richesses différentes et à 0,1 % de concentration en hydrocarbure. (Yahyaoui et al., 2003).

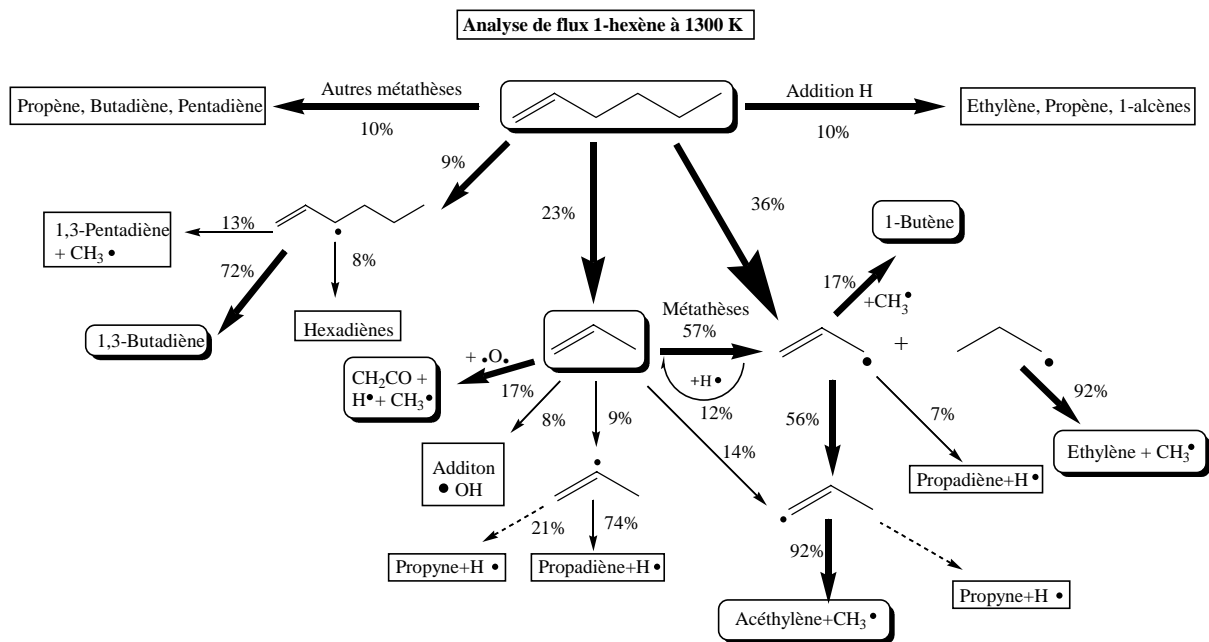


Figure A-III-19 : Analyse de flux à 50 % de consommation du 1-hexène et 1300 K.

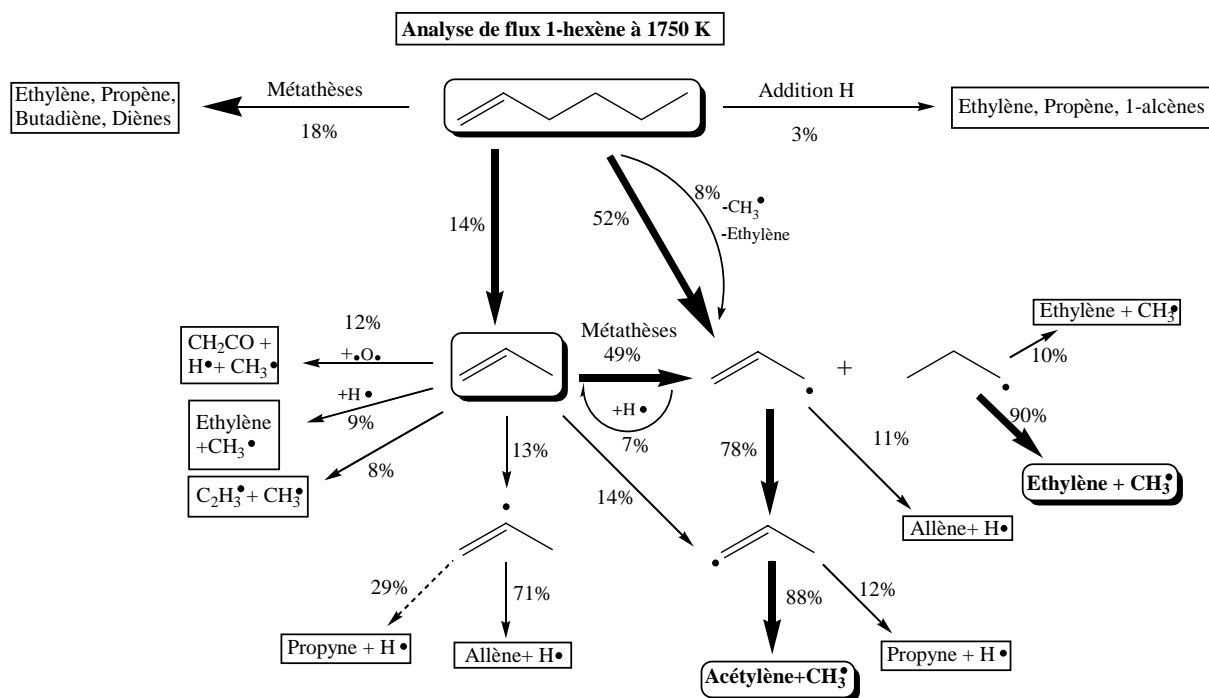


Figure A-III-20 : Analyse de flux à 50 % de consommation du 1-hexène et 1750 K.

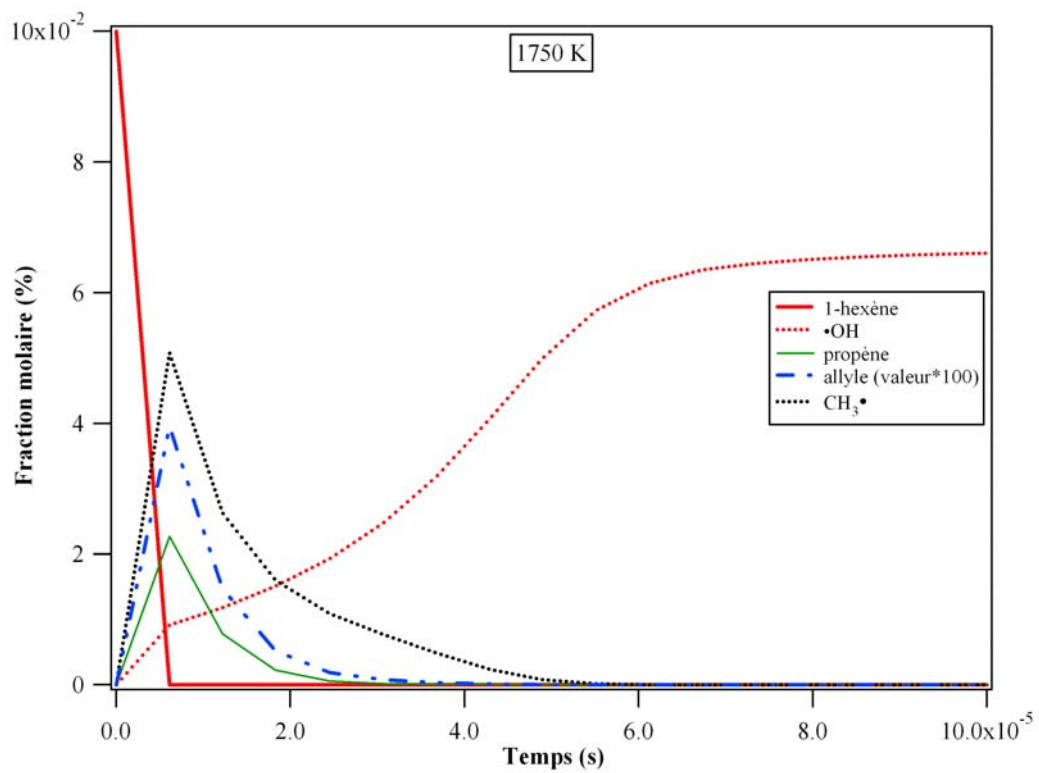
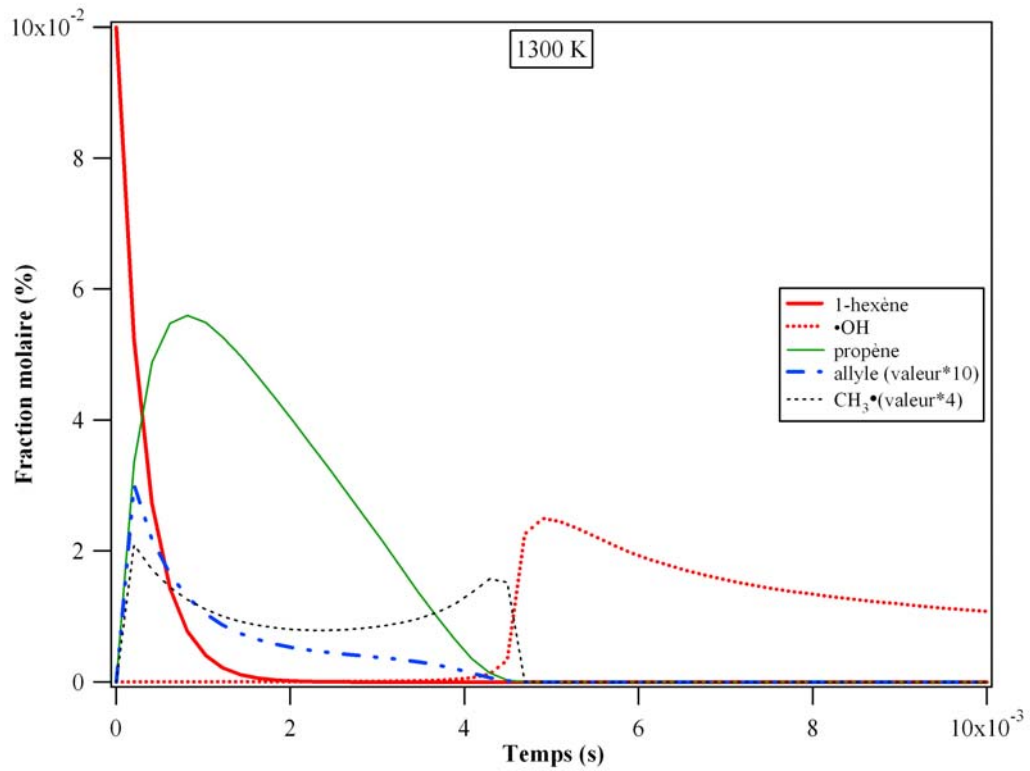


Figure A-III-21 : Profils de concentration des produits de combustion du **1-hexène** en tube à onde de choc à basse pression ($P=200$ kPa), à $\phi = 1$ et à 1300 et 1750 K.

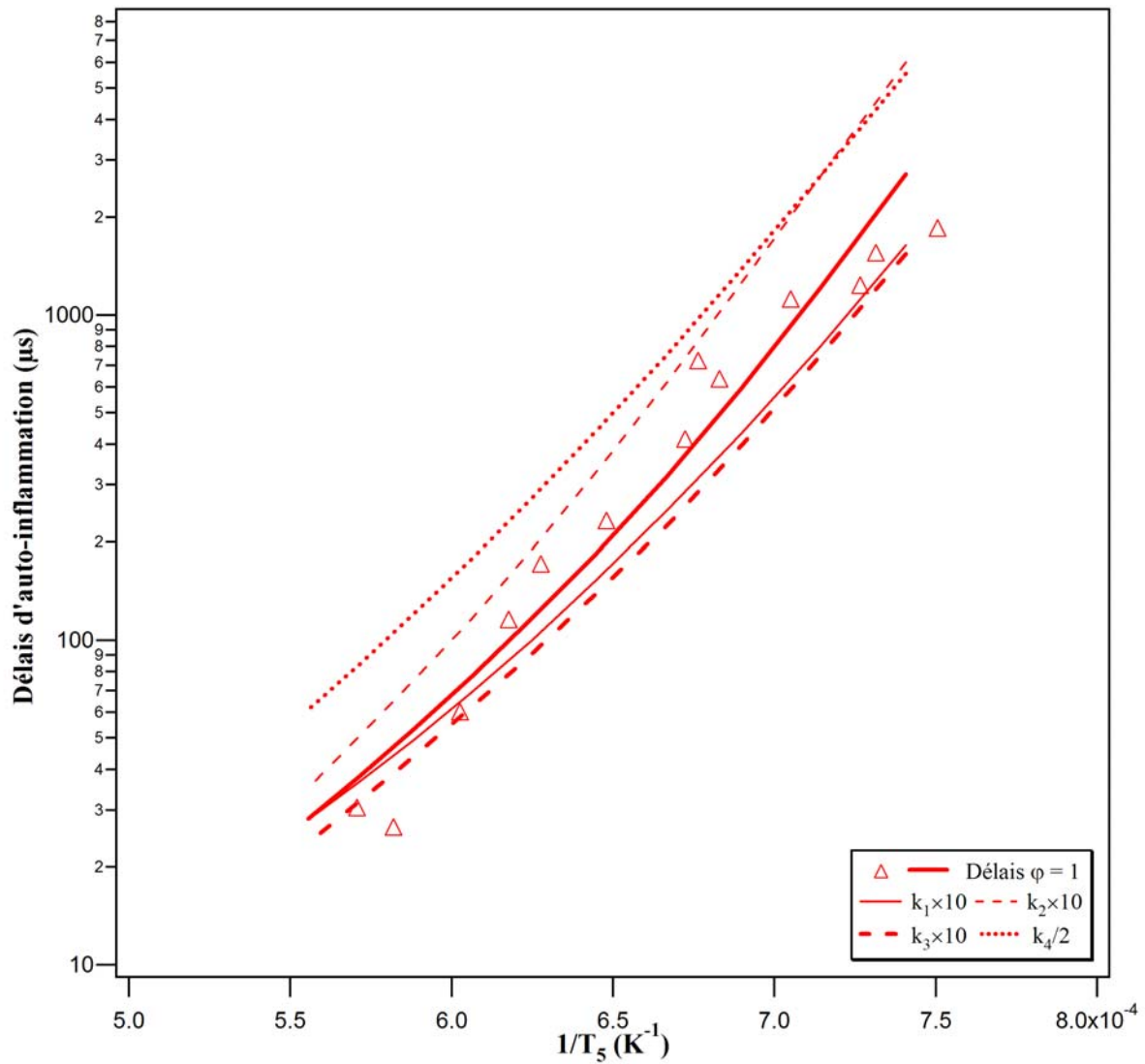


Figure A-III-22 : Analyse de sensibilité des réactions de consommation du **1-hexène** en tube à onde de choc à $\varphi = 1$ et 0,1% de concentration en hydrocarbure .

k_1 : Constante cinétique de la réaction d'amorçage unimoléculaire,

k_2 : Constante cinétique de la réaction moléculaire rétro-ène,

k_3 : Constante cinétique de la réaction de la base C₀-C₂ : $\text{CH}_3\bullet + \text{O}_2 = \bullet\text{OH} + \text{HCHO}$,

k_4 : Constante cinétique de la réaction de la base C₀-C₂ : $\text{H}\bullet + \text{O}_2 = \bullet\text{OH} + \bullet\text{O}\bullet$.

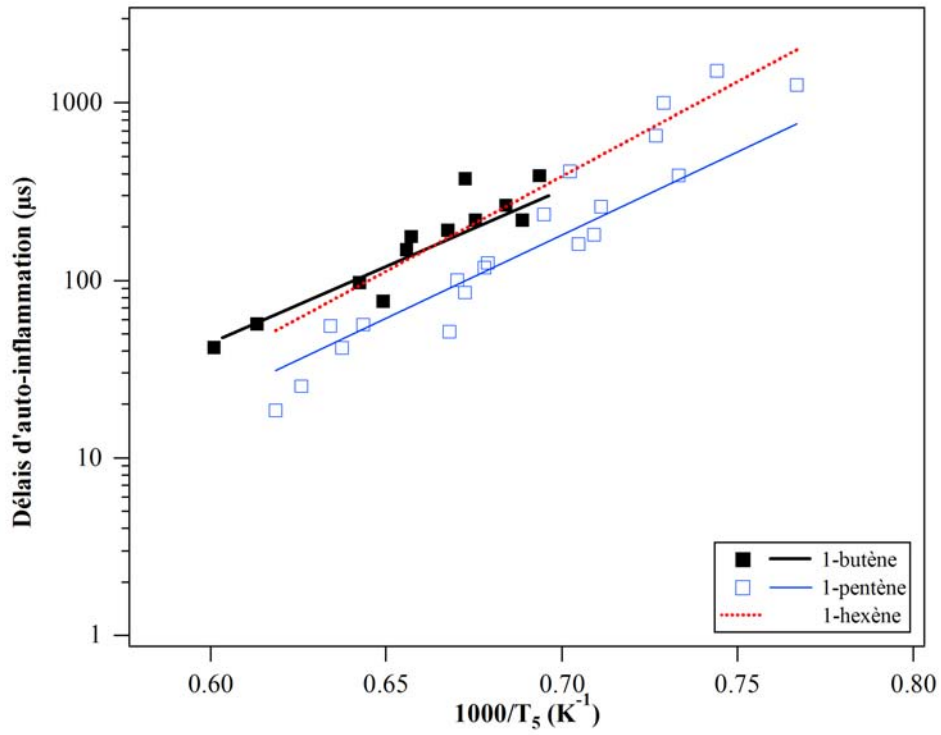


Figure A-III-23 : Comparaison des délais d'auto-inflammation du **1-butène**, du **1-pentène** et du **1-hexène** pour une richesse de 1, une concentration en hydrocarbure de 1 % et une pression moyenne de 8,5 kPa.

COMBUSTION DE L'ISO-OCTANE

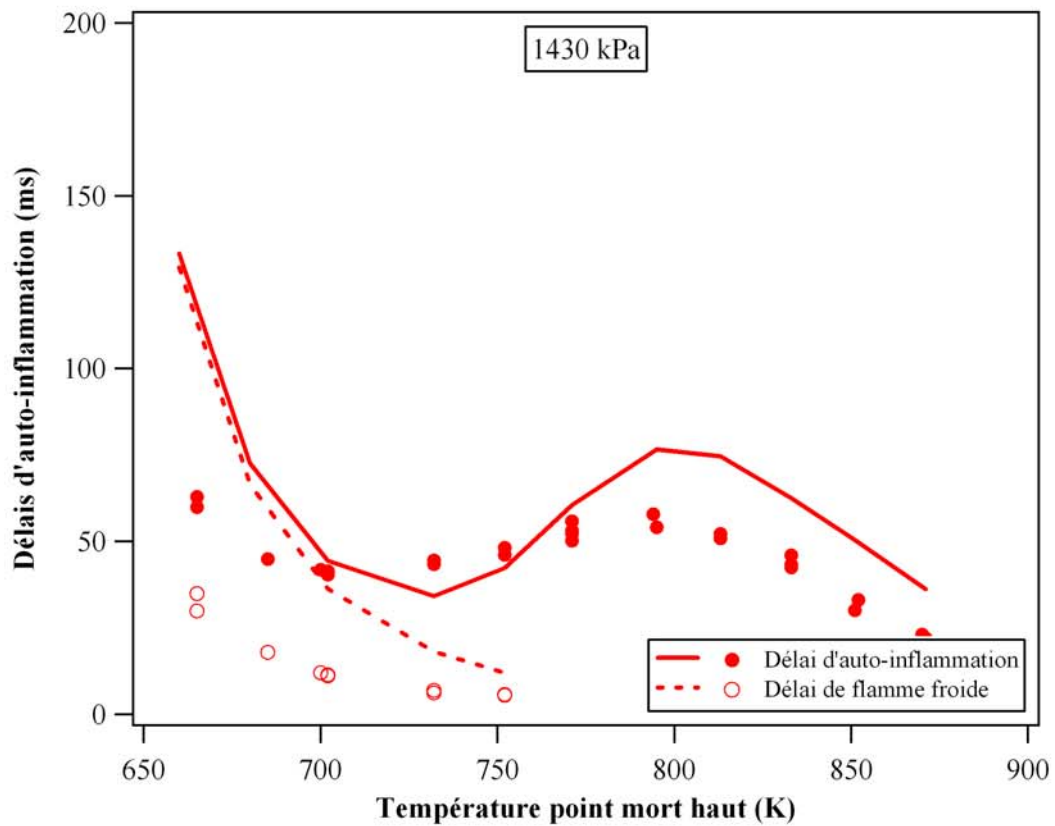
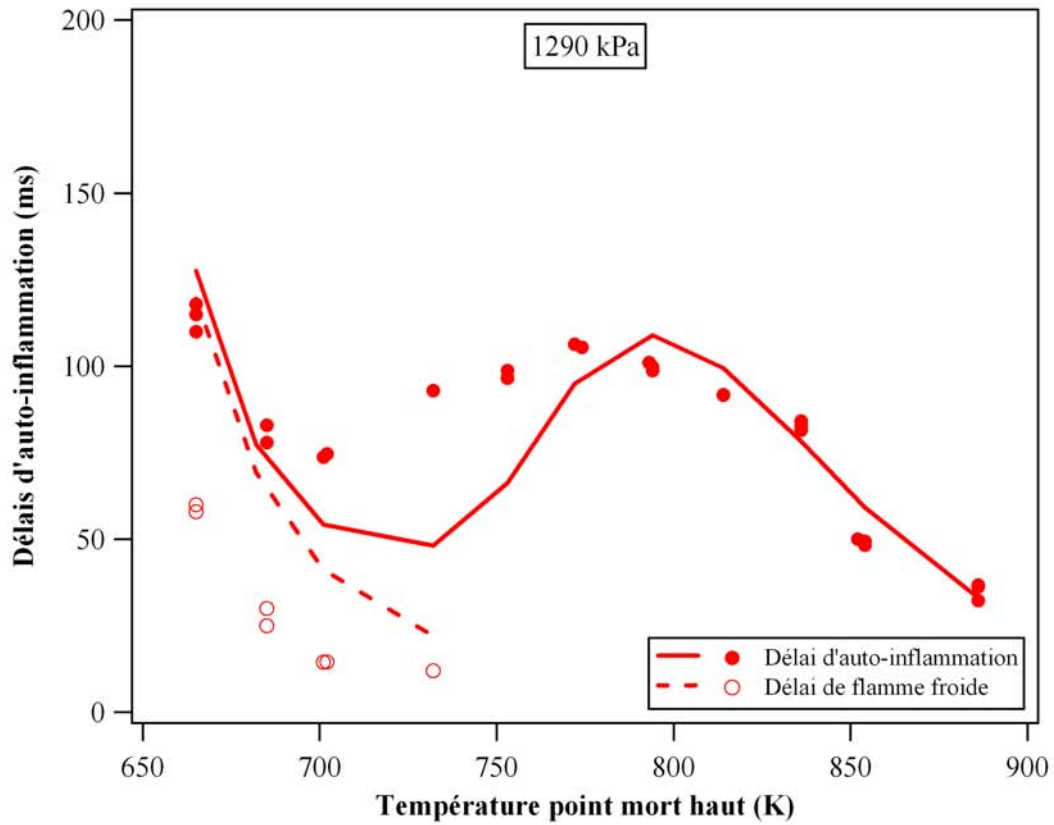


Figure A-III-24 : Délais d'auto-inflammation de *l'iso-octane* en machine à compression pour une richesse de 1 et pour des pressions moyennes après compression de 1290 et 1430 kPa (Buda et al., 2005).

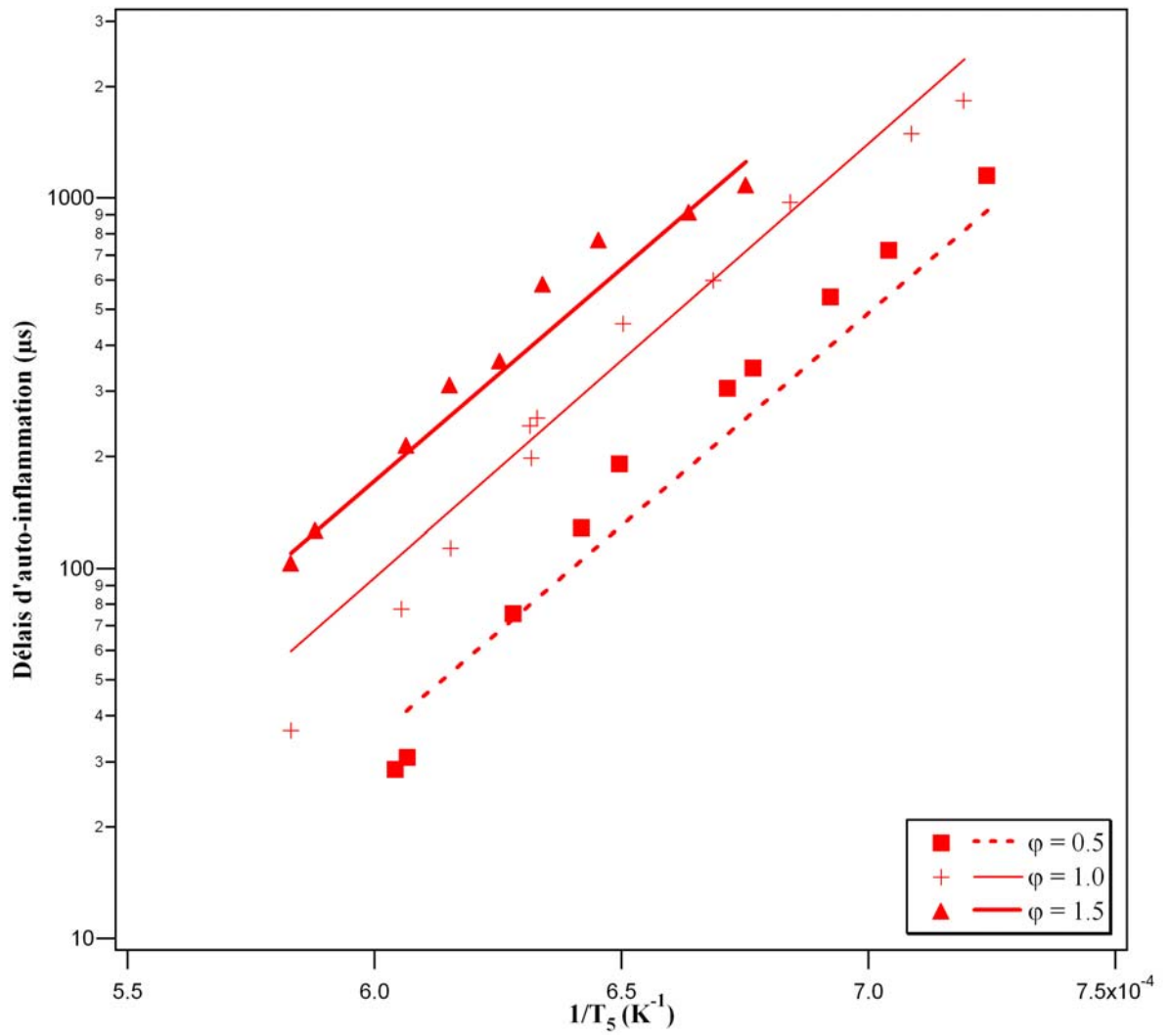


Figure A-III-25 : Evolution des délais d'auto-inflammation de l'iso-octane en tube à onde de choc, à basse pression (~ 210 kPa), pour une concentration en hydrocarbure de 0,1 % et pour trois richesses différentes (Yahyaoui et al., 2002).

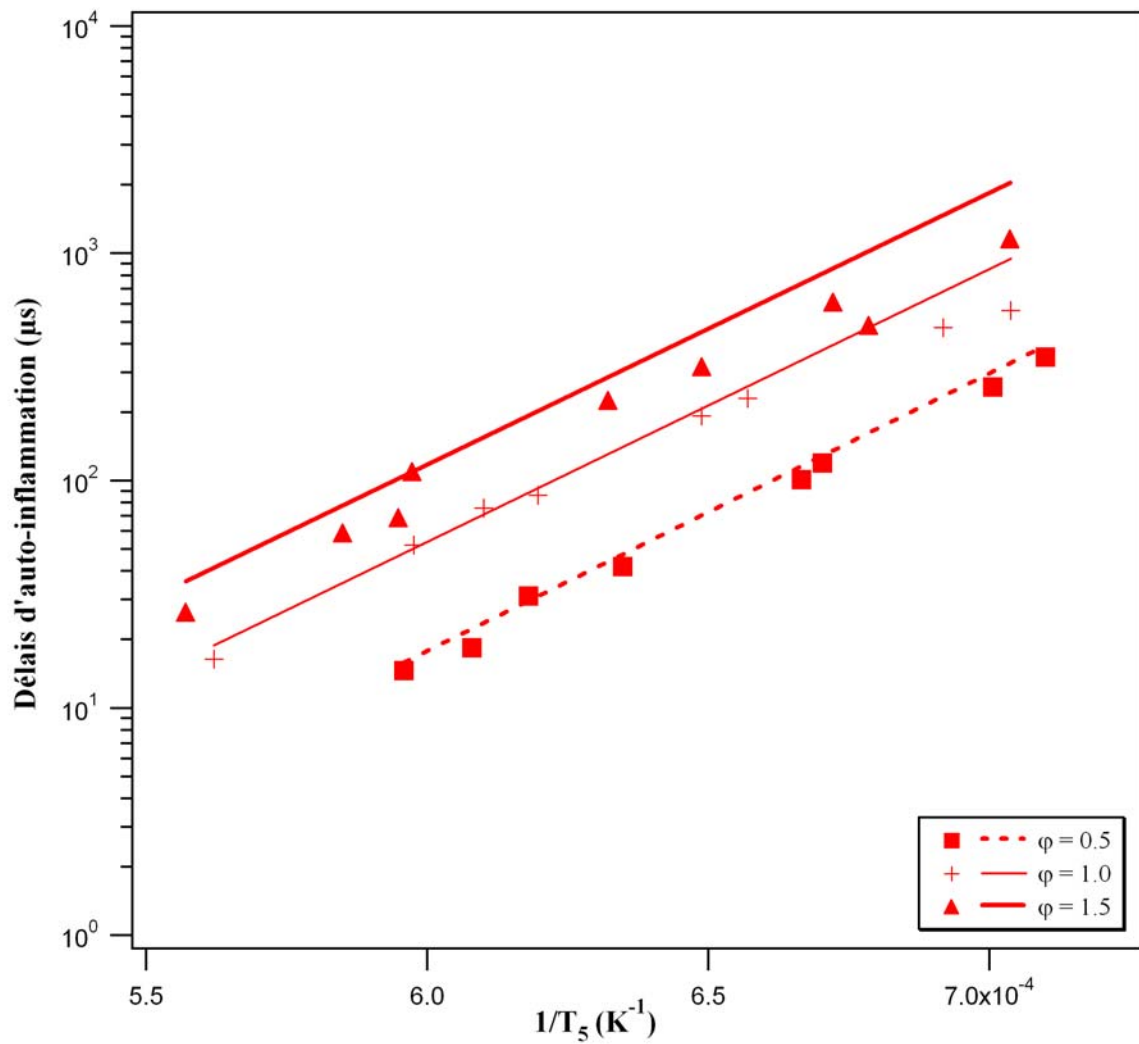


Figure A-III-26 : Délais d'auto-inflammation de l'iso-octane en tube à onde de choc et à haute pression (~1033 kPa), pour trois richesses différentes (0,5 ; 1,0 ; 1,5), pour une concentration d'hydrocarbure de 0,1 % (Yahyaoui et al., 2002).

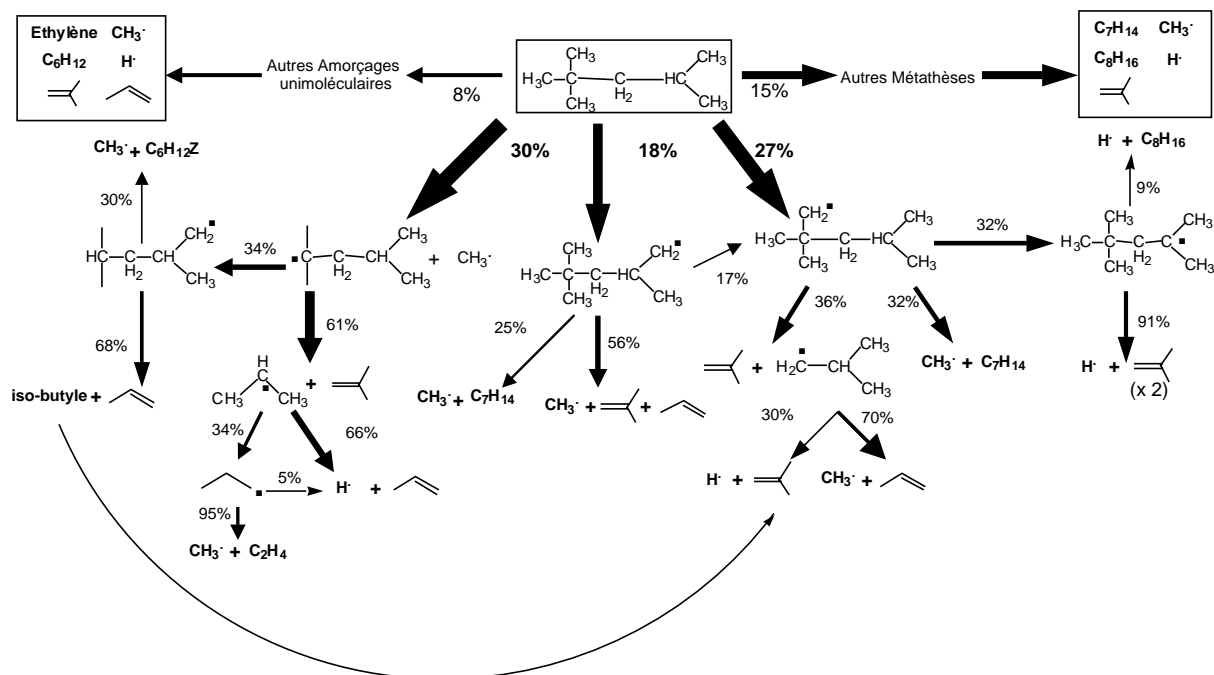


Figure A-III-27 : Analyse des voies de consommation de l'iso-octane pur à 20 % de conversion du réactif et 1368 K.

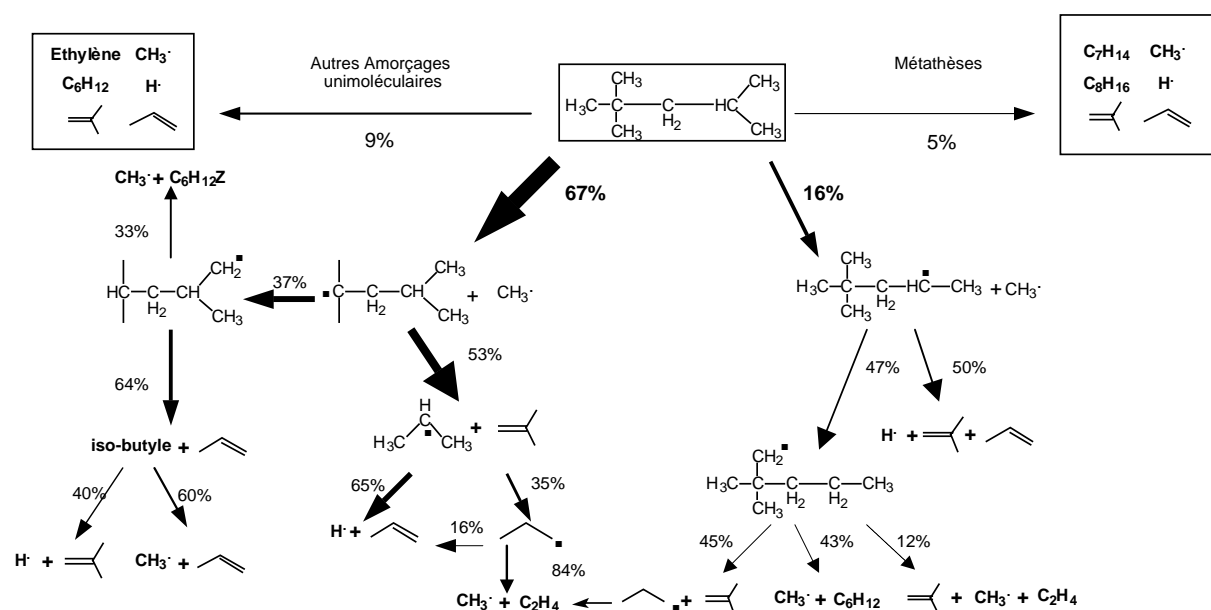


Figure A-III-28 : Analyse des voies de consommation de l'iso-octane pur à 20 % de conversion du réactif et 1715 K.

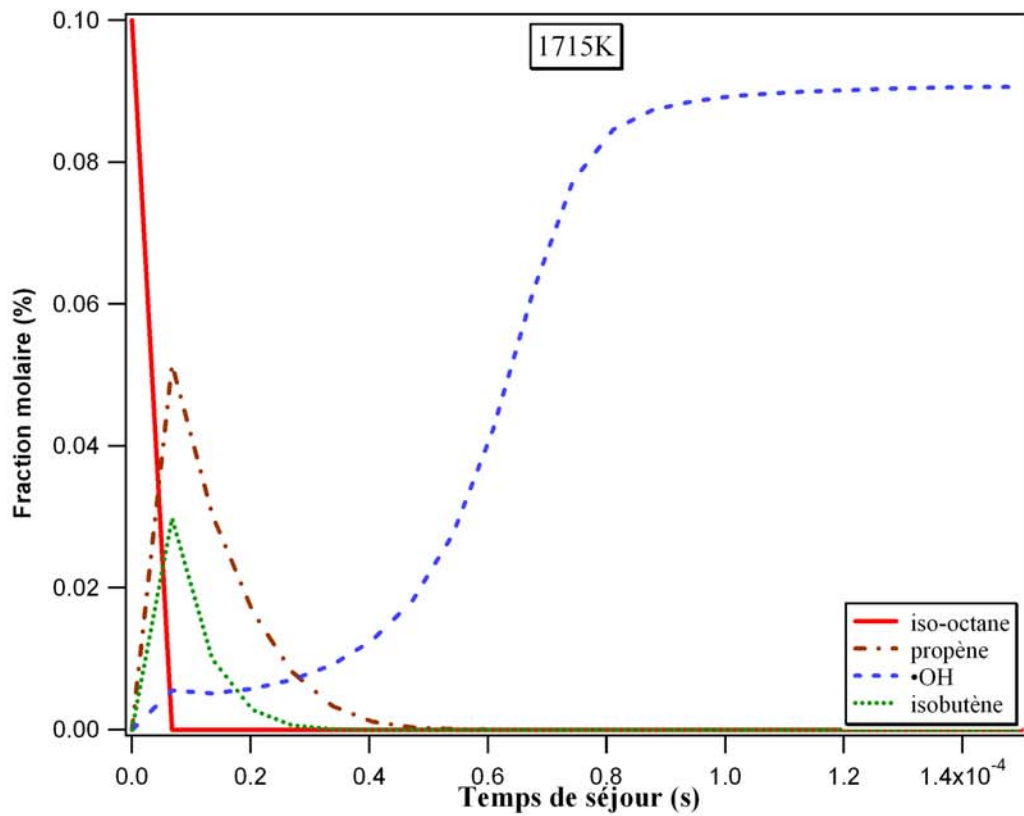
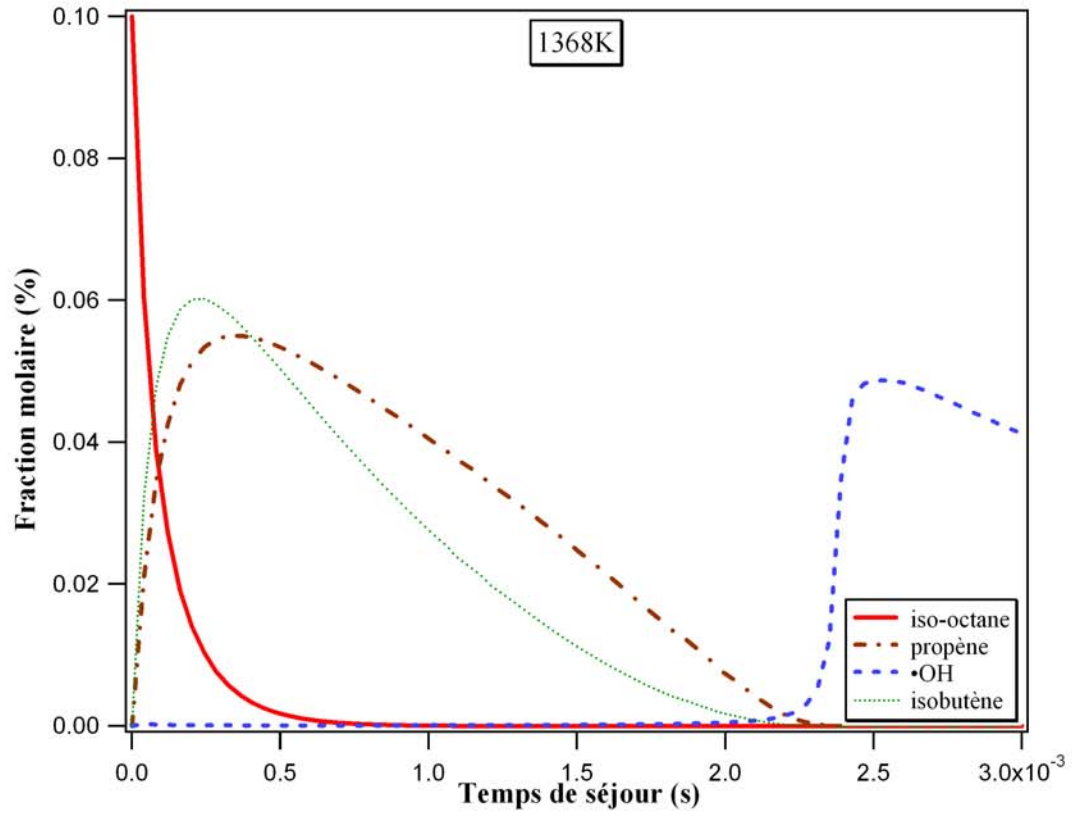


Figure A-III-29 : Profils de concentration des produits de combustion de l'iso-octane à 1368 et 1715 K.

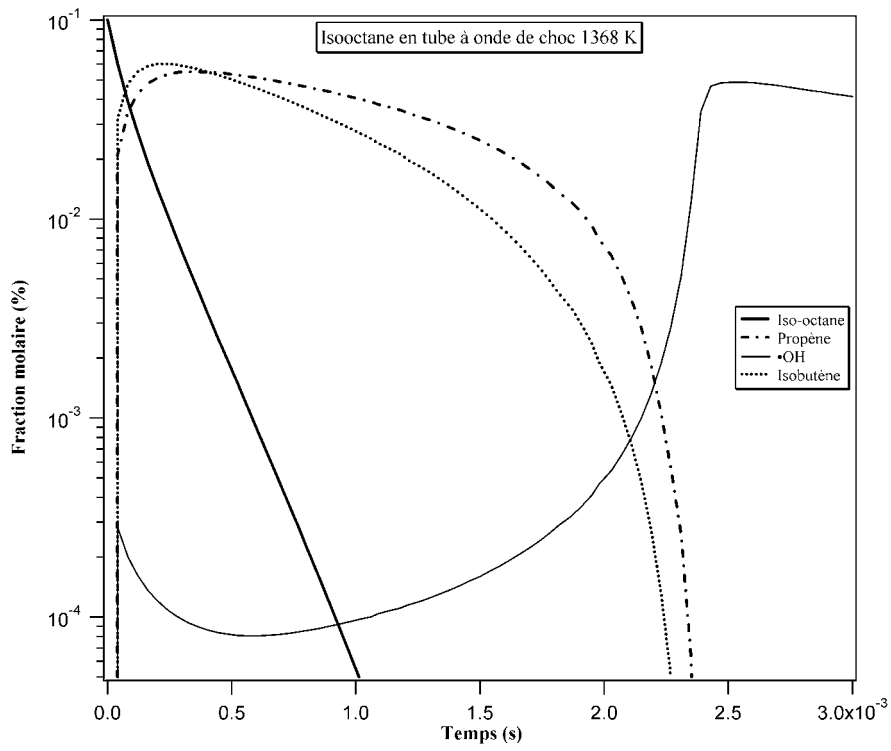


Figure A-III-30 : Profils de concentration des produits de combustion de l'iso-octane à 1368K.

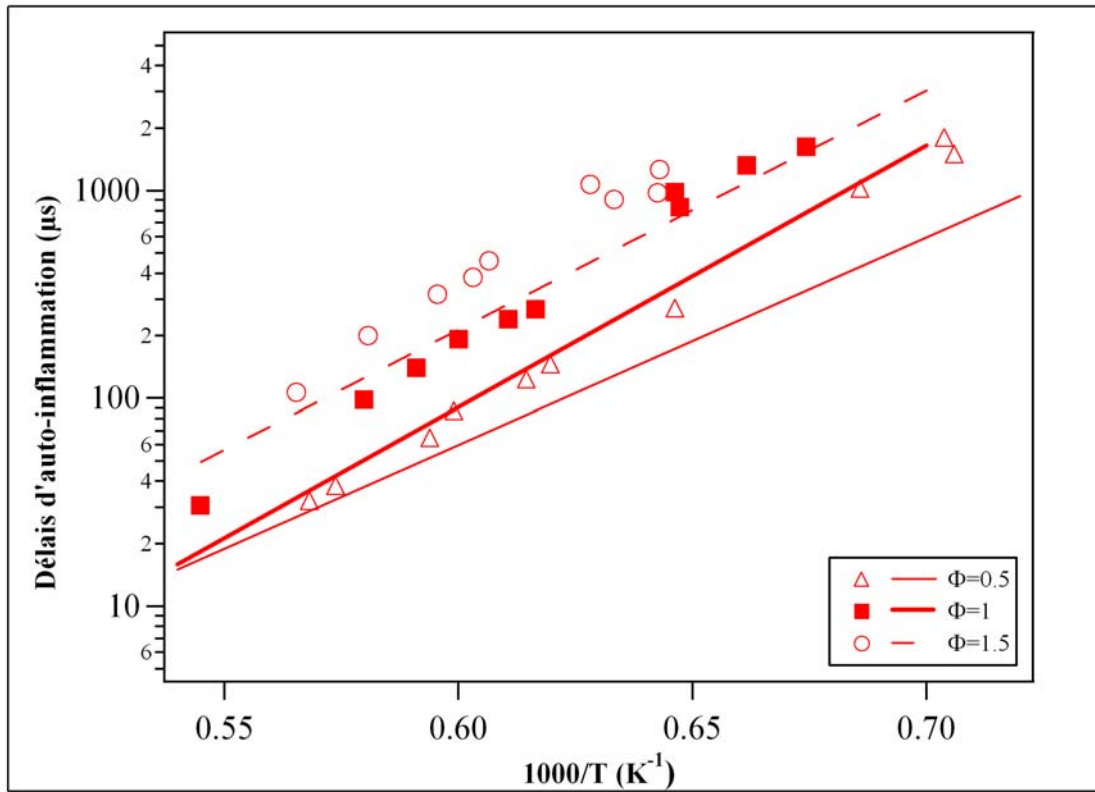


Figure A-III-31 : Délais d'auto-inflammation du **toluène** en tube à onde de choc pour une pression de 110 kPa, pour trois richesses différentes (0,5 ; 1,0 ; 1,5), pour une concentration d'hydrocarbure de 0,4 % (Pengloan, 2001).

COMBUSTION DU MELANGE
1-HEXENE/ISO-OCTANE

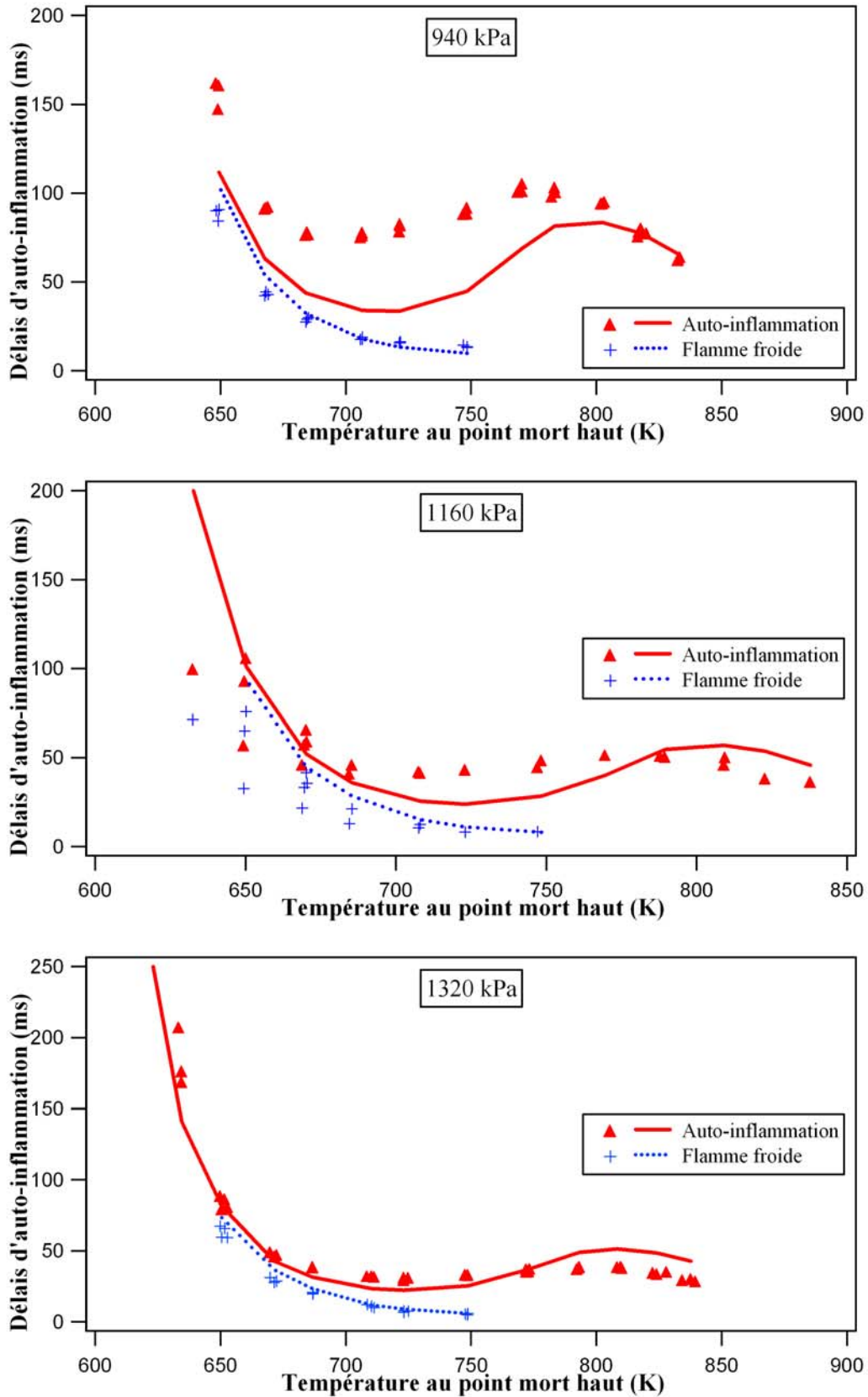


Figure A-III-32 : Délais d'auto-inflammation du mélange stœchiométrique 1-hexène/iso-octane 18/82 en machine à compression rapide pour des pressions moyennes après compression de 940, 1160 et 1320 kPa (Vanhove, 2004).

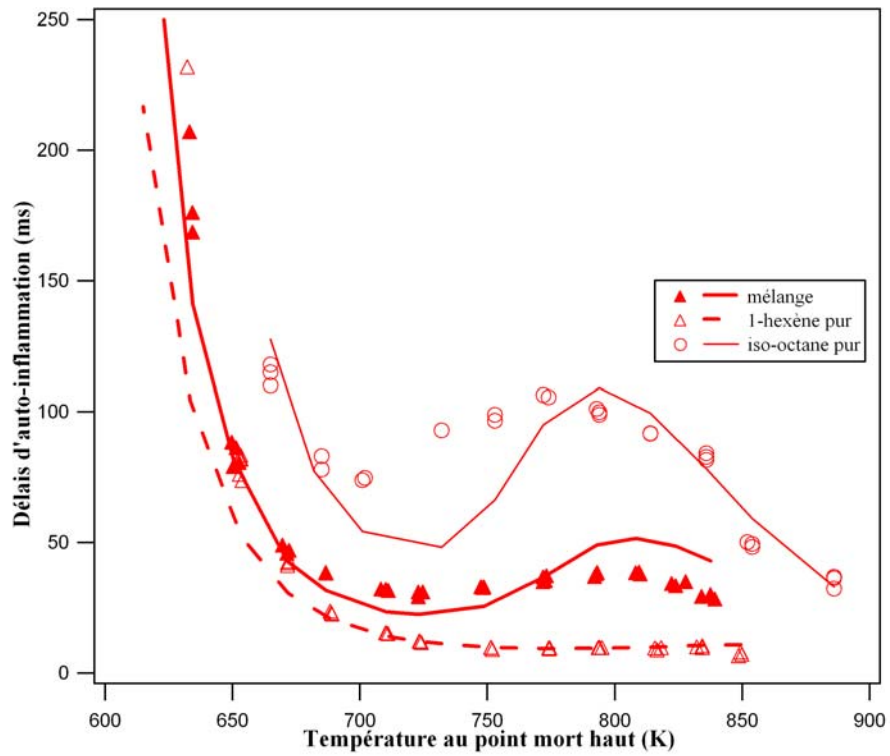
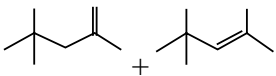
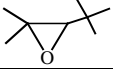
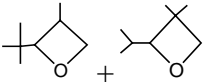
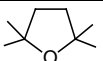
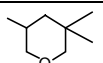




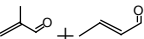





Figure A-III-33 : Comparaison à concentration en carbone initial constante des délais expérimentaux et simulés en machine à compression rapide pour le 1-hexène (2,28 % en concentration d'hydrocarbure), l'iso-octane (1,65 % en concentration d'hydrocarbure) et le mélange 1-hexène/iso-octane 18/82 (1,74 % en concentration d'hydrocarbure). (Minetti, 1998 ; Vanhove, 2004).

Tableau A-III-3 : Comparaison des sélectivités expérimentales et calculées des produits d'oxydation du mélange 1-hexène/iso-octane 18/82 après la flamme froide pour une température au point mort haut de 707 K, une conversion calculée de 22 % en 1-hexène et de 57 % en iso-octane (Vanhove, 2004).

Produits	Expériences	Simulations
Produits primaires		
Propène	2,16	1,8
Isobutène	9,9	8,4
Hexadiènes	<1,8	0,7
Diméthylpentènes	>1,8	2,2
	4,1	15,2
	0,2	3,5
	6,7	1,1
	10,1	14,9
	1,2	0,4
 + pentanal	1,1	0,2
Produits secondaires		
Acroléine	0,8	1,4
Propanal	0,6	0,3
Acétone	2,3	5,2
Propèrol	0,04	0,01
	0,2	0,003
	0,1	0,7
	1,1	1,3
	0,8	0,1
	0,1	0,002
	0,3	0,1
	0,1	-
C ₈ cétones	1,5	-
Diméthyl pentadiène	0,1	0,1
Produits de la base de réactions C₀-C₂		
CO	0,3	7,0
Méthanol	0,2	0,3
Ethylène	0,8	11,0
Acétaldéhyde	1,6	2,8

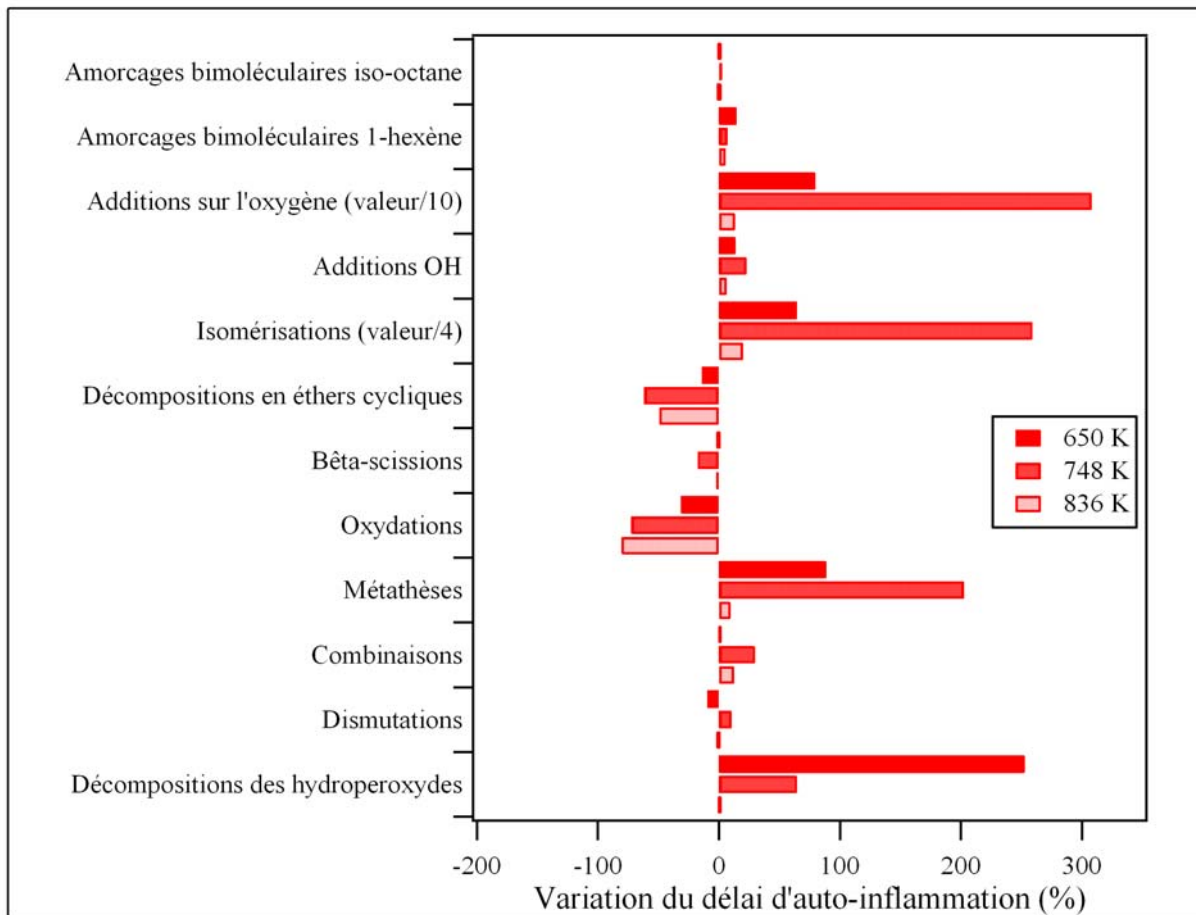


Figure A-III-34 : Analyse de sensibilité des constantes cinétiques des processus élémentaires du mécanisme primaire et des décompositions des hydroperoxydes pour l'oxydation du mélange **1-hexène/iso-octane** 18/82, à trois températures situées avant (650 K), dans (748 K) et après (836 K) la zone du coefficient négatif de température.

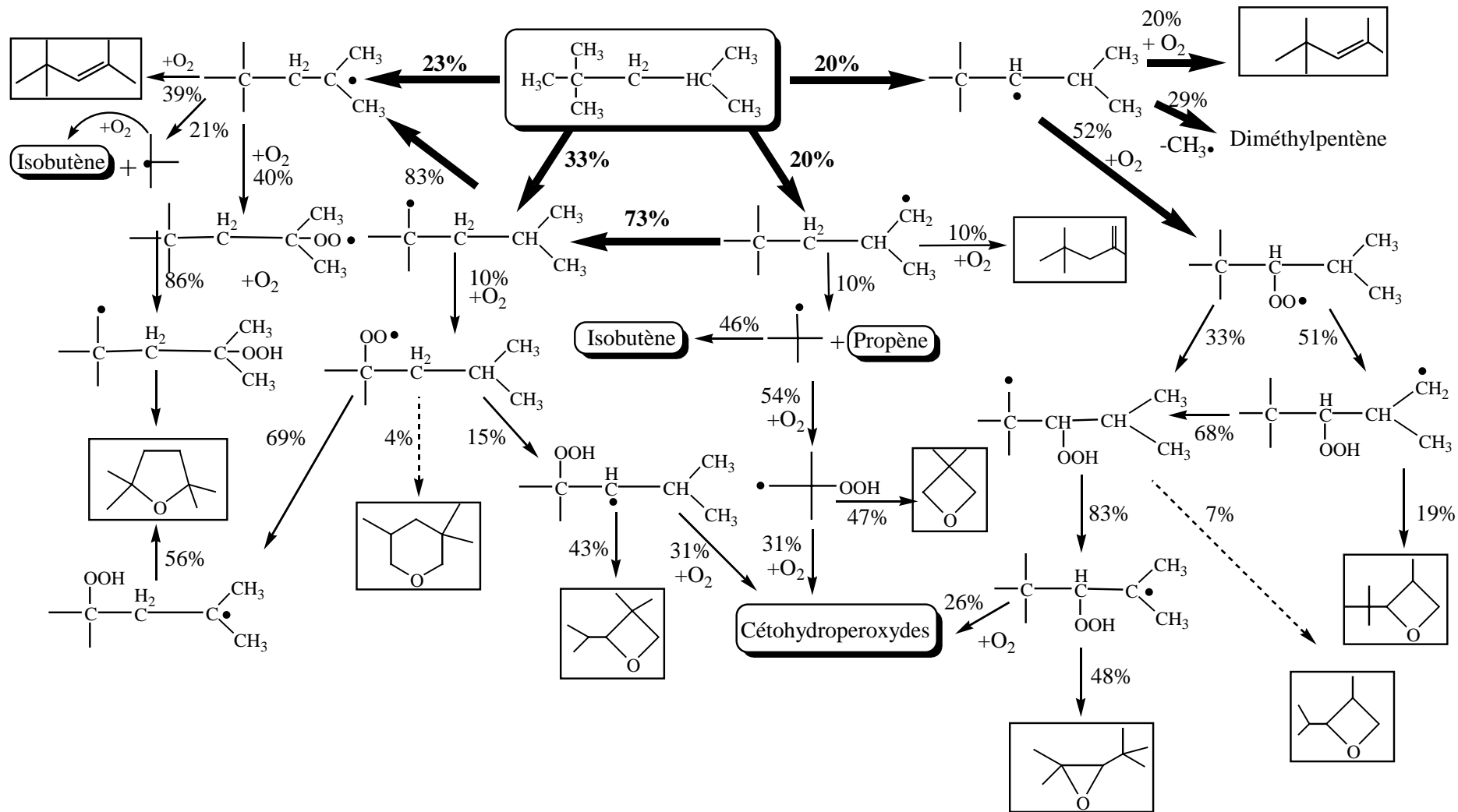


Figure A-III-35 : Analyse des flux de consommation de l'iso-octane, pour le mélange stœchiométrique 1-hexène/iso-octane 18/82 après la flamme froide à $T_{analyse} = 857 \text{ K}$, avec $T_{PMH} = 707 \text{ K}$ et $P_{PMH} = 1350 \text{ kPa}$, et une concentration initiale en hydrocarbure de 1,74 %

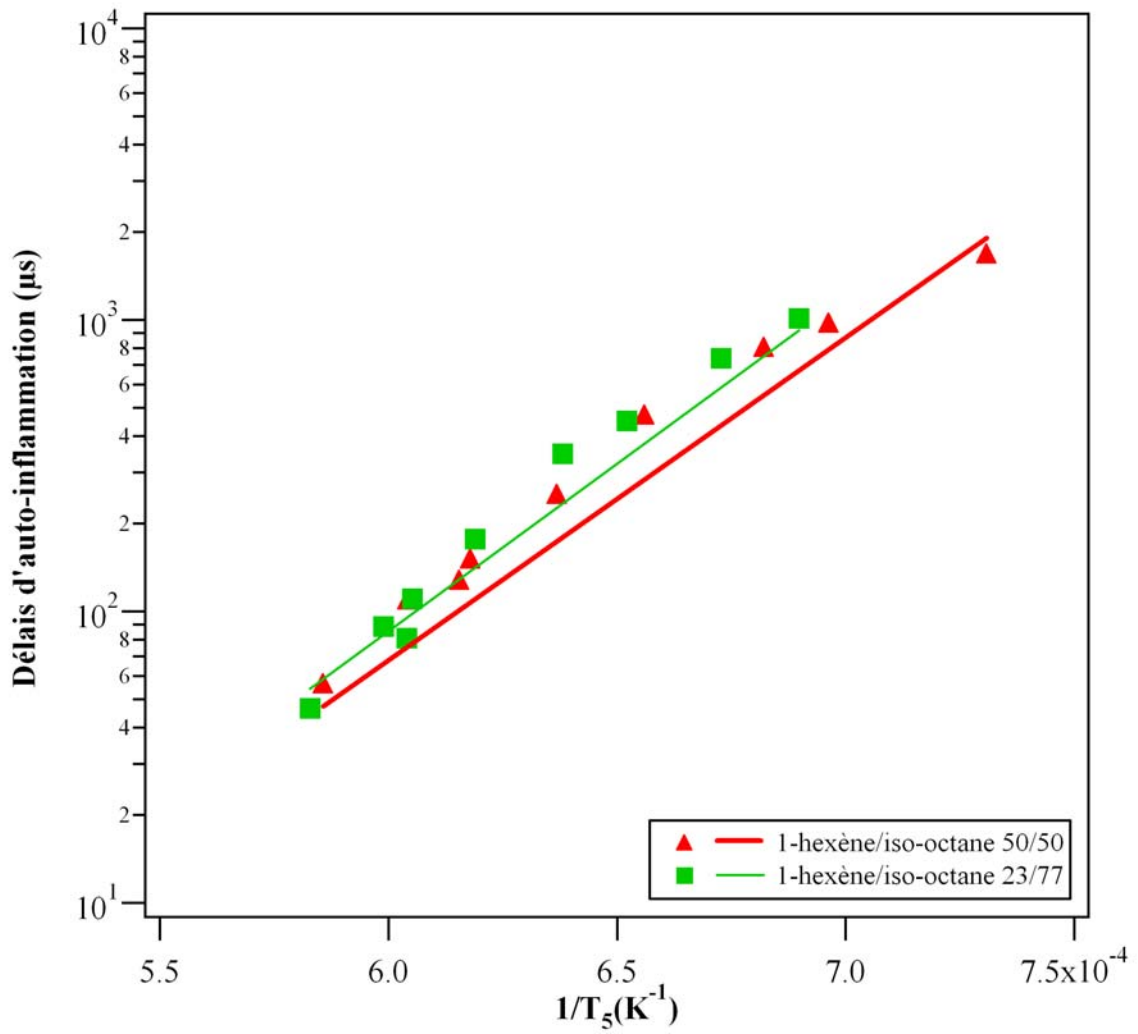


Figure A-III-37 : Délais d'auto-inflammation de mélanges **1-hexène/iso-octane** pour une pression moyenne de 210 kPa et une richesse de 1 (Yahyaoui et al., 2004).

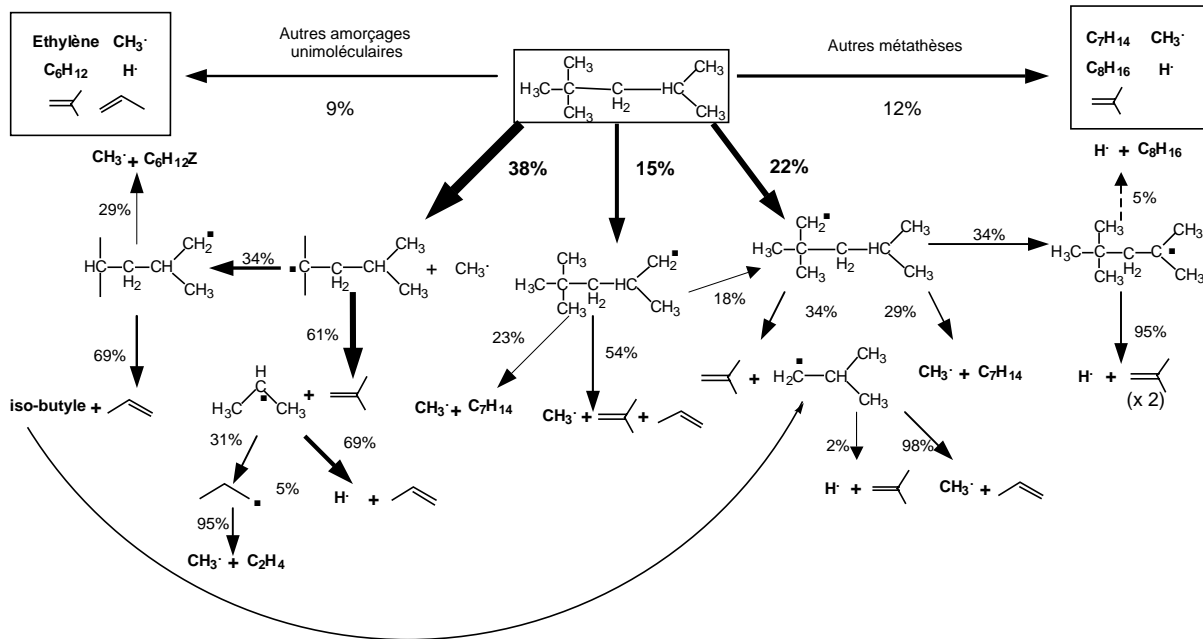


Figure A-III-38 : Analyse des voies de consommation de l'iso-octane dans le mélange iso-octane/1-hexène 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C_8 et à 1368 K.

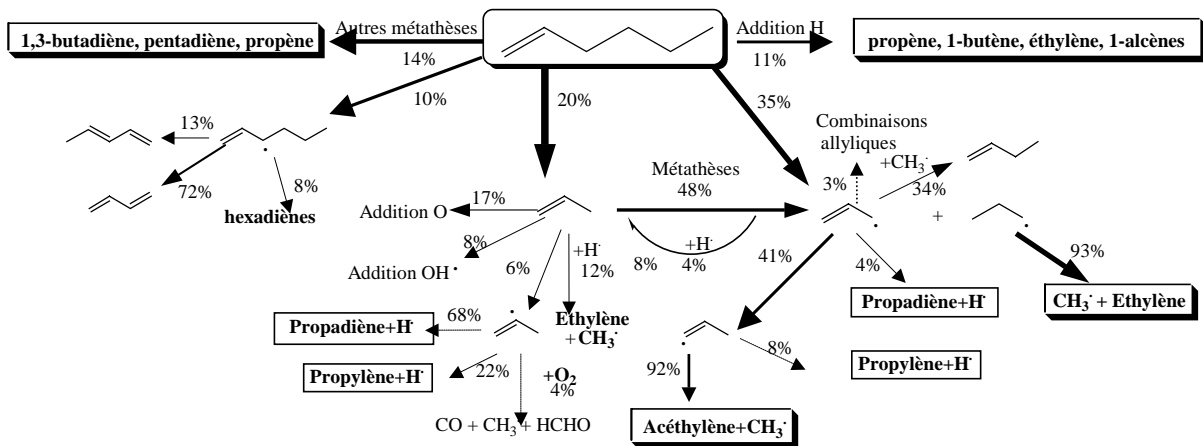


Figure A-III-39 : Analyse des voies de consommation du 1-hexène dans le mélange iso-octane/1-hexène 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C_6 et à 1368 K.

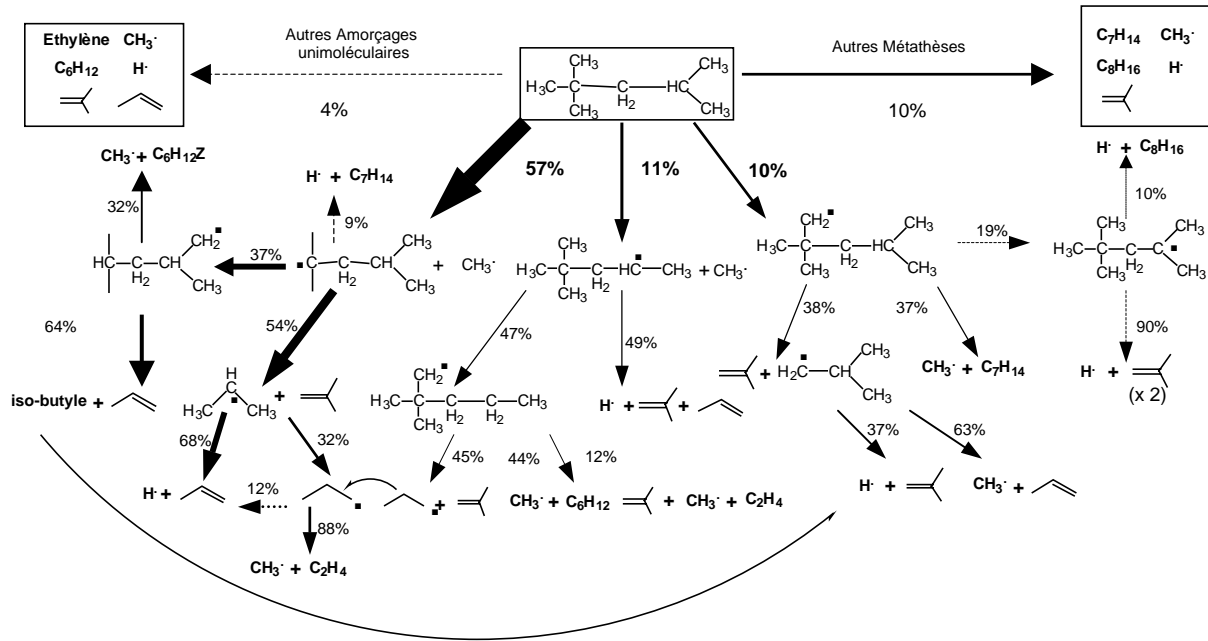


Figure A-III-40 : Analyse des voies de consommation de l'iso-octane dans le mélange iso-octane/1-hexène 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C₈ et à 1707 K.

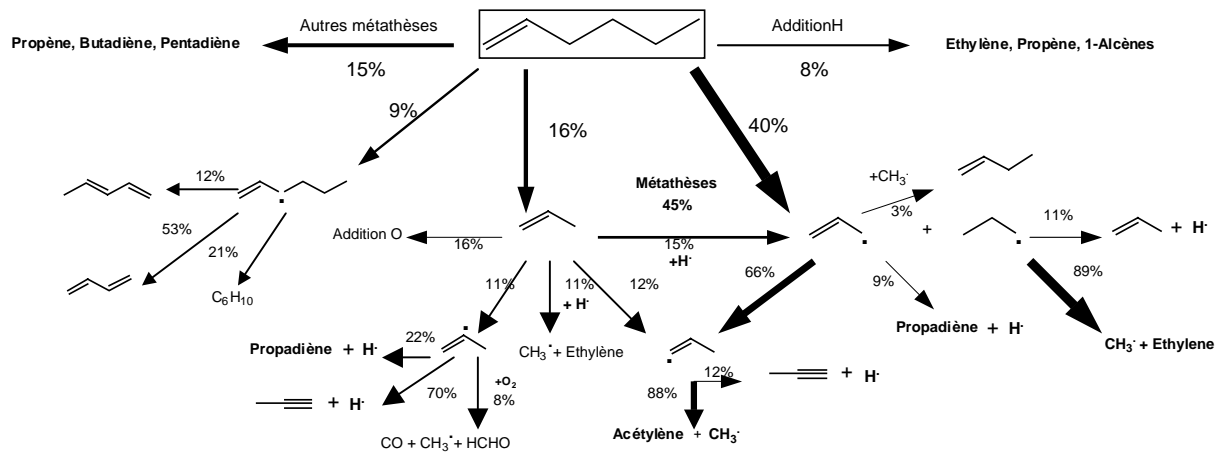


Figure A-III-41 : Analyse des voies de consommation du 1-hexène dans le mélange iso-octane/1-hexène 50/50 à 50 % de conversion du réactif en C₆ et à 1707 K.

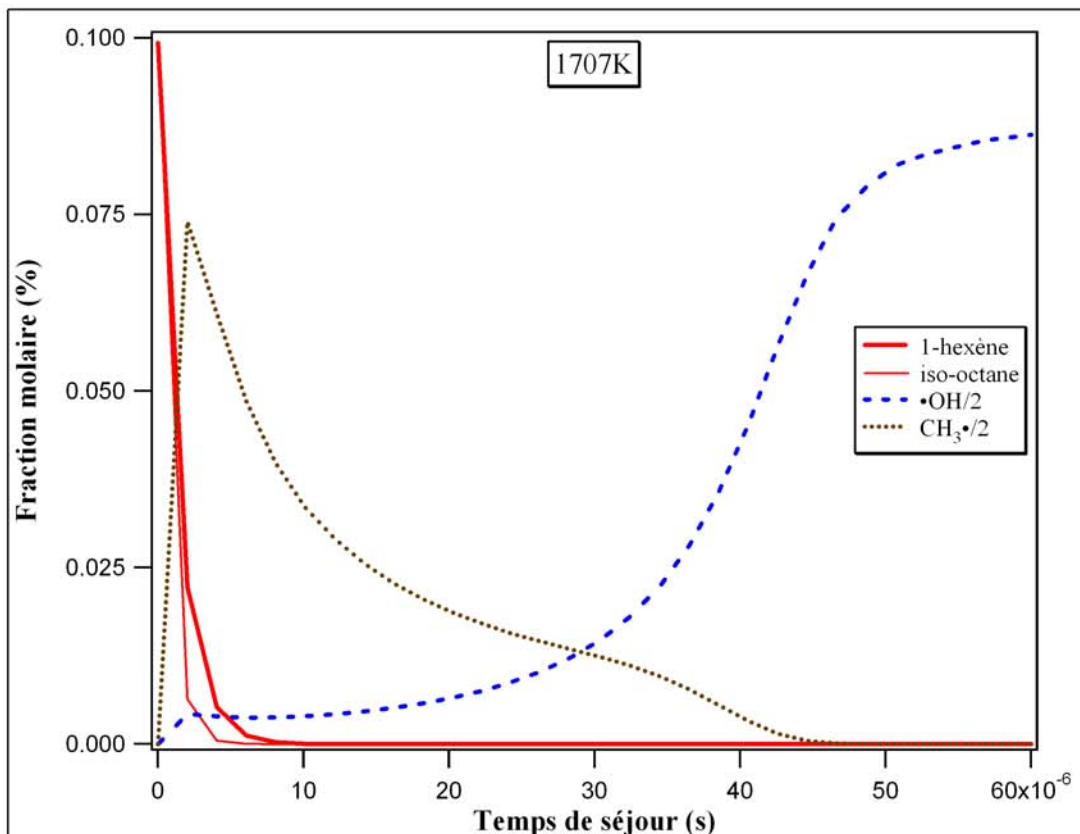
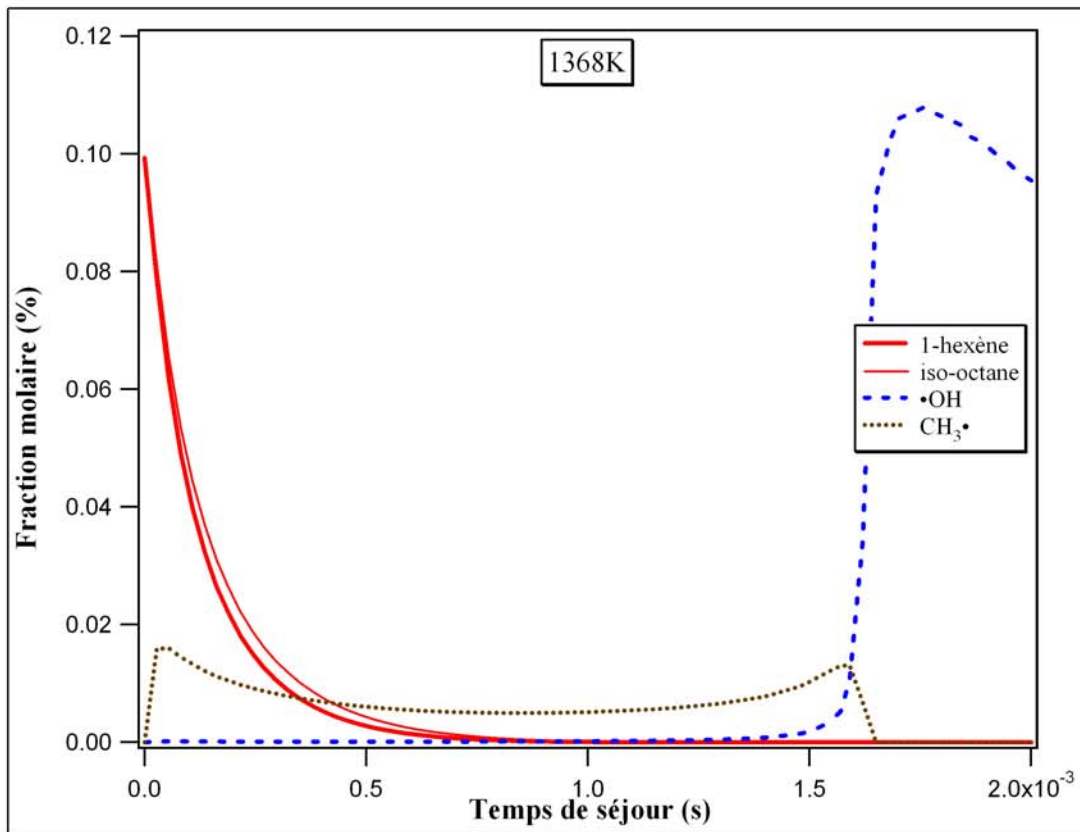


Figure A-III-42 : Profil de concentration des produits de combustion du mélange 1-hexène/iso-octane 50/50 à 1368 et 1707 K.

**COMBUSTION D'AUTRES MELANGES BINAIRES ET
TERNAIRES CONTENANT DU 1-HEXENE, DE
L'ISO-OCTANE ET DU TOLUENE**

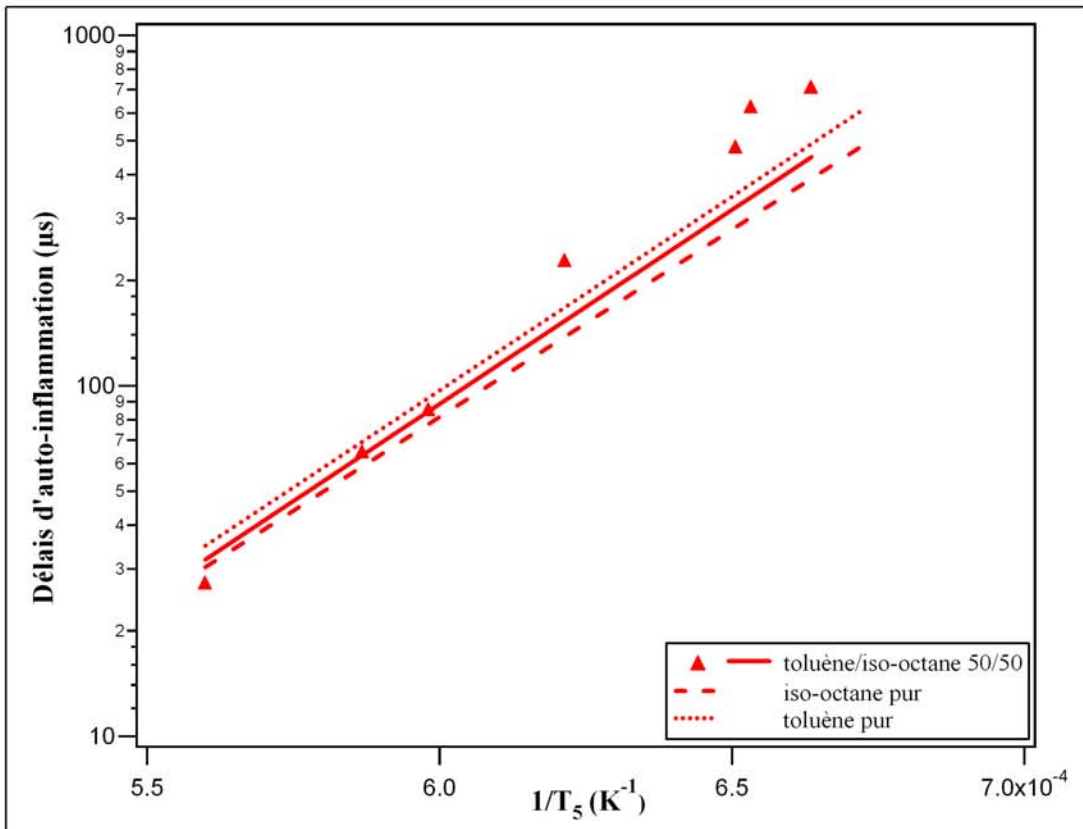
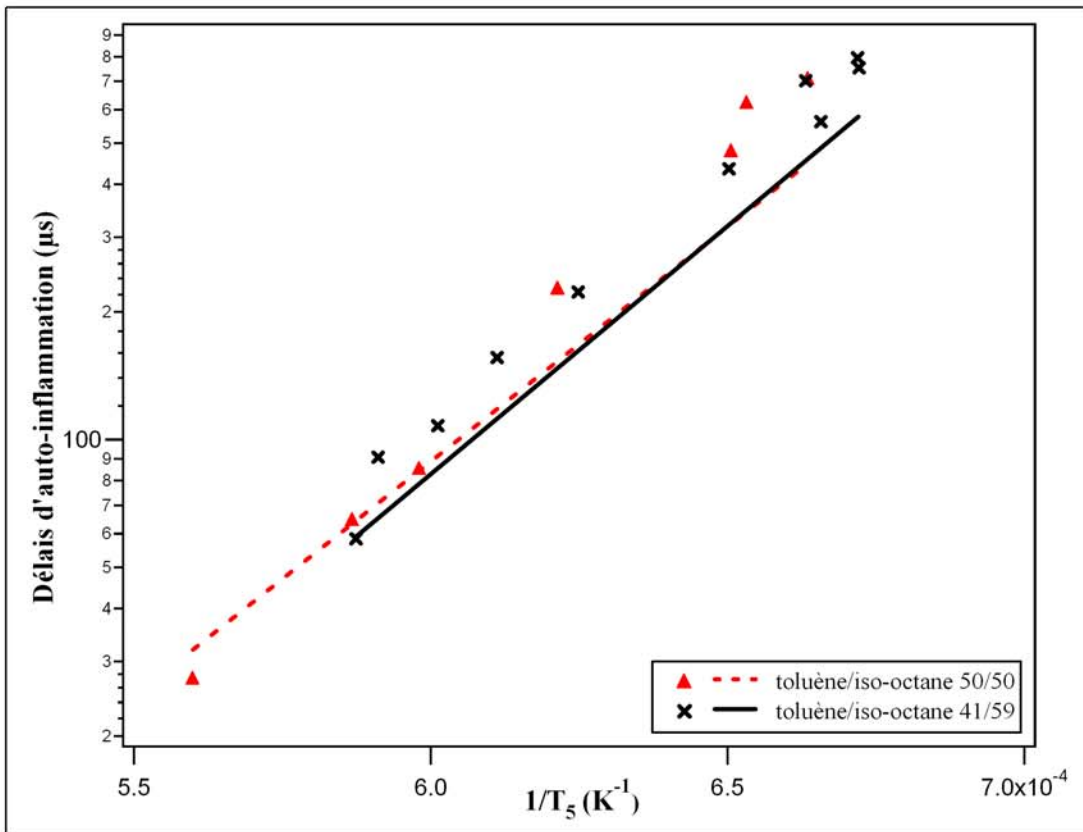


Figure A-III-43 : Délais d'auto-inflammation de mélanges *iso-octane/toluène* à richesse 1 et 0,2 % en concentration d'hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2002).

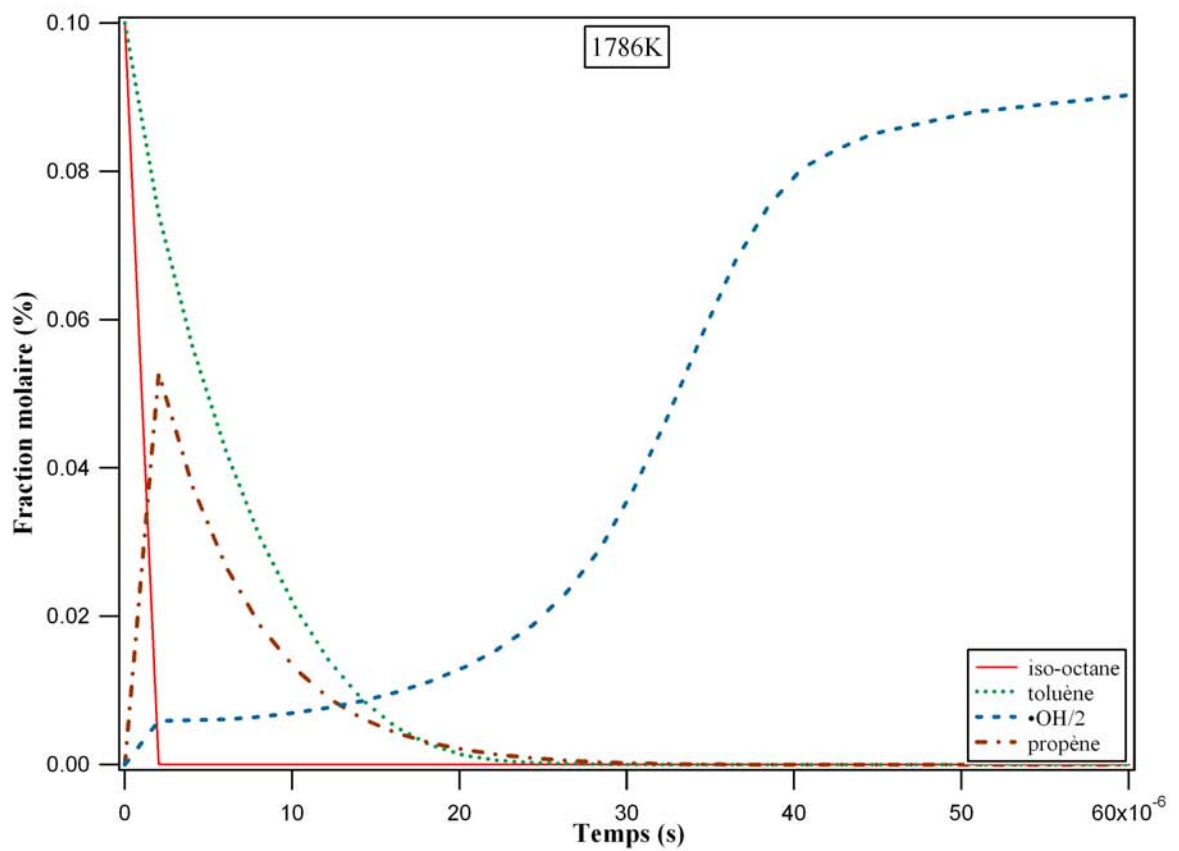
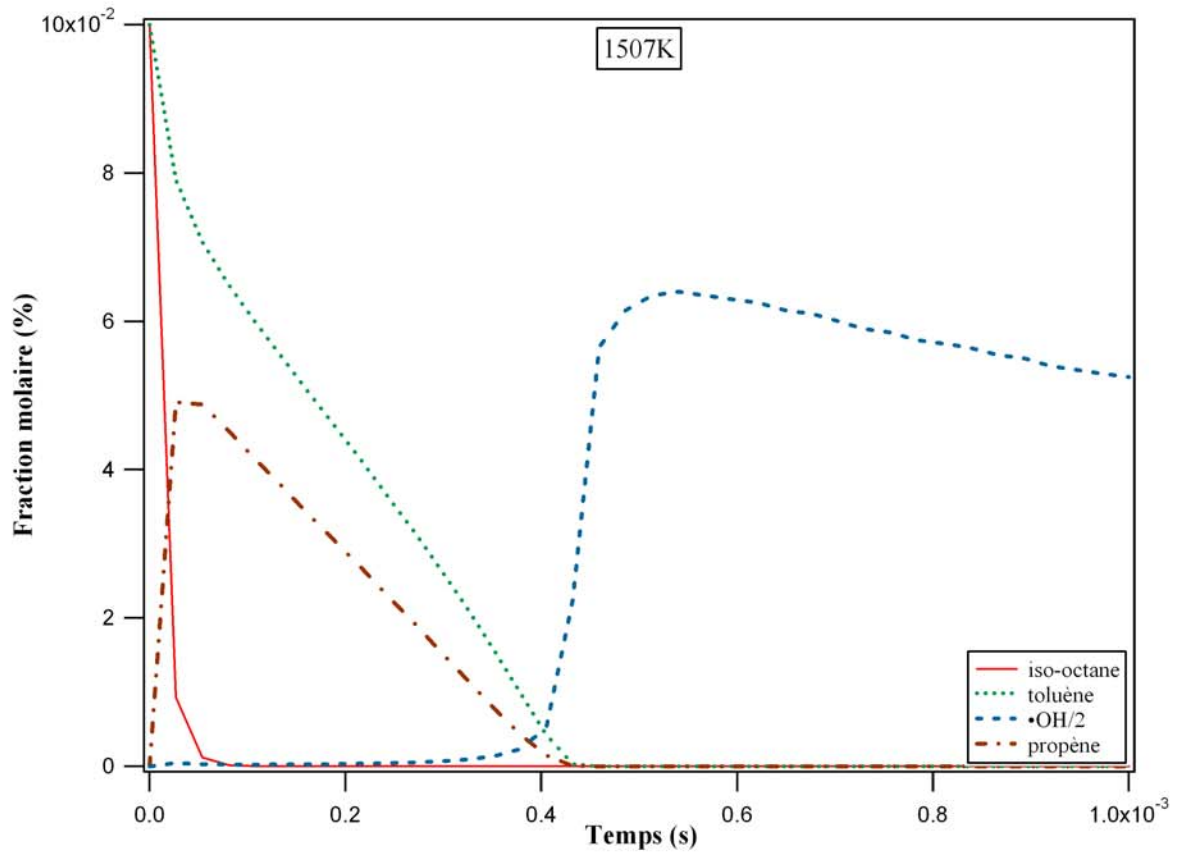


Figure A-III-44 : Profils de concentration des produits de combustion du mélange iso-octane/toluène 50/50 à 1507 et 1786 K.

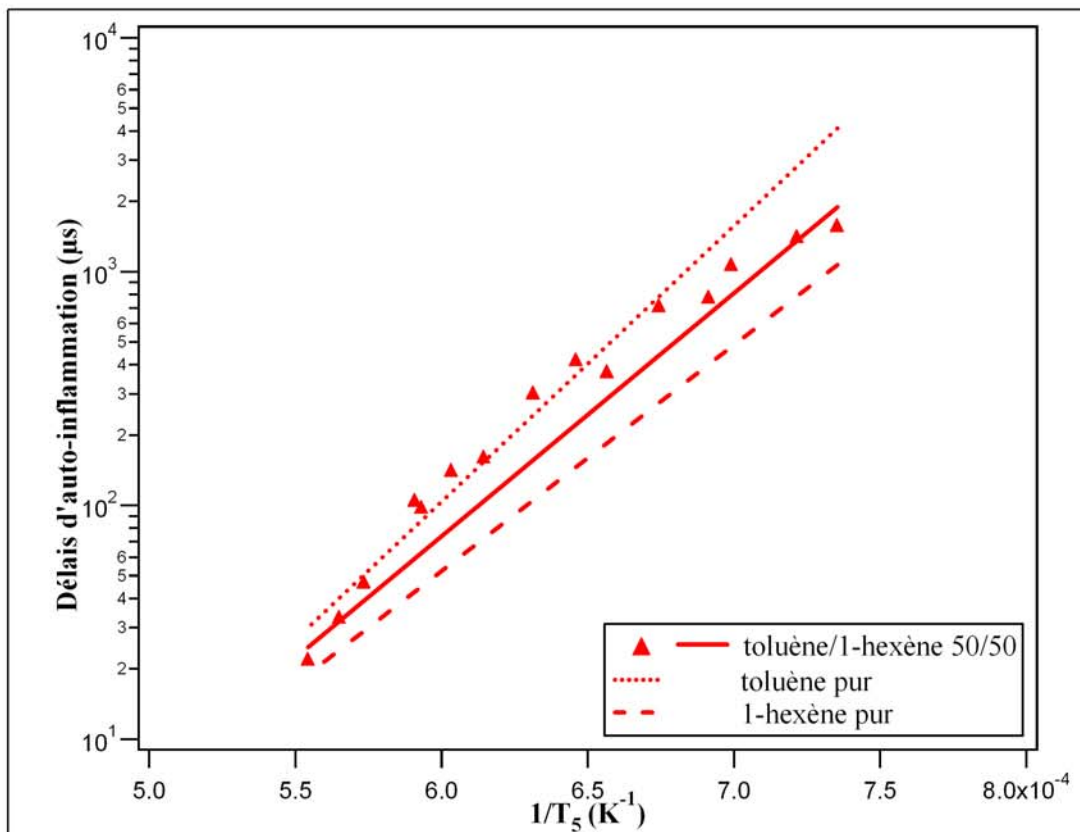
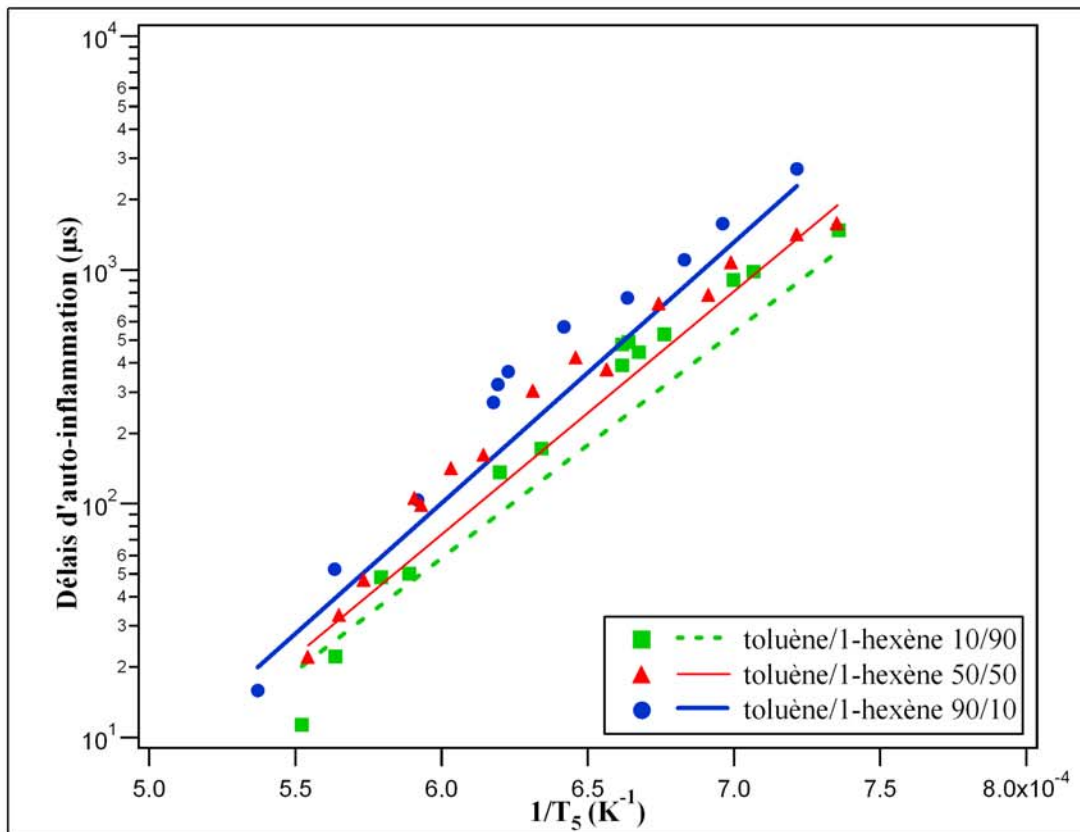


Figure A-III-45 : Délais d'auto-inflammation de mélanges **toluène/1-hexène** à richesse $\phi = 1$ et $0,2$ % en concentration d'hydrocarbure (Yahyaoui et al., 2002).

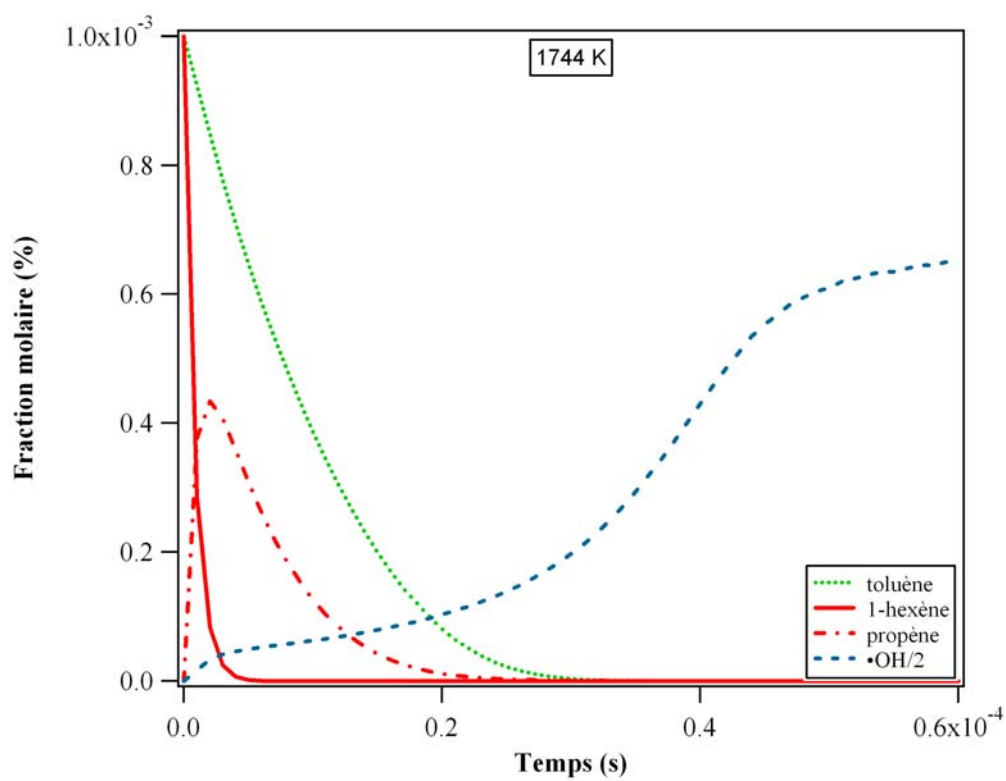
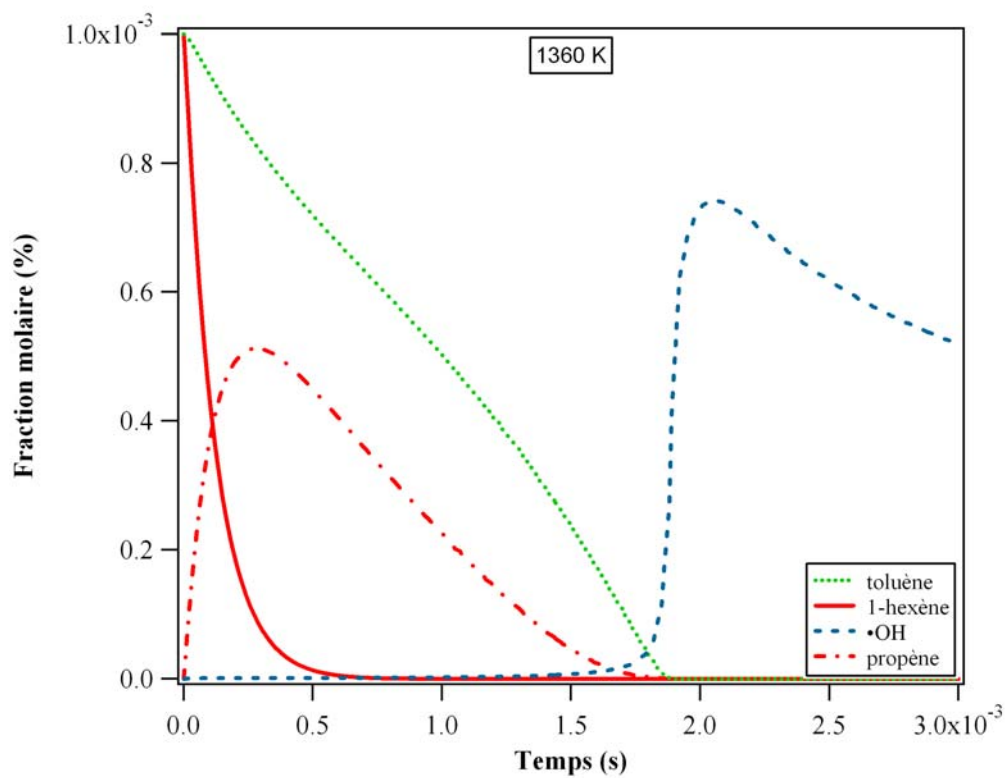


Figure A-III-46 : Profils de concentration des produits de combustion du mélange toluène/1-hexène 50/50 à 1360 et 1744 K.

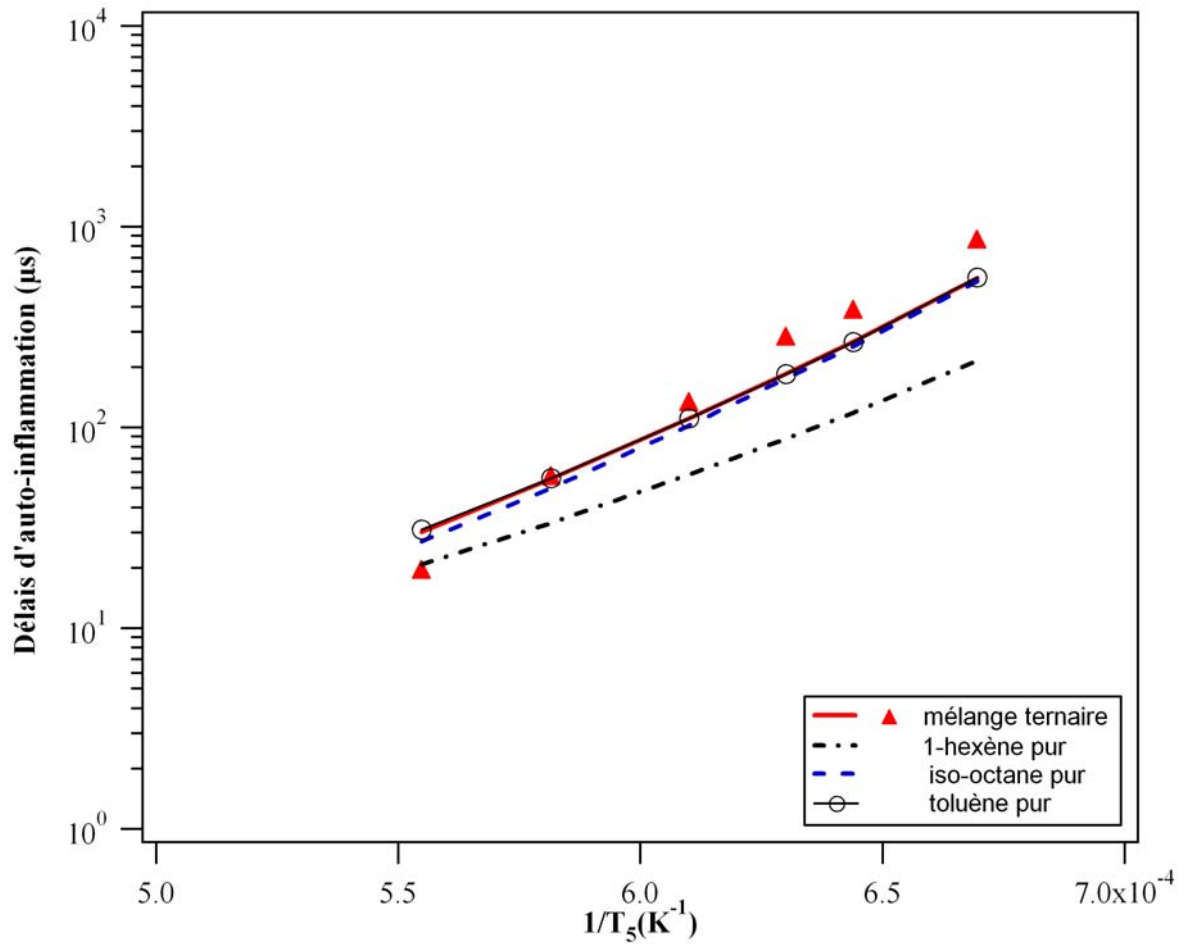


Figure A-III-47 : Délais d'auto-inflammation du mélange stœchiométrique iso-octane/toluène/1-hexène 50/35/15, pour une concentration en hydrocarbure de 0,2% et une pression moyenne $P = 210 \text{ kPa}$ (Yahyaoui et al., 2002). Comparaison avec les délais simulés pour les produits purs dans les mêmes conditions de richesse et de concentration en hydrocarbure.

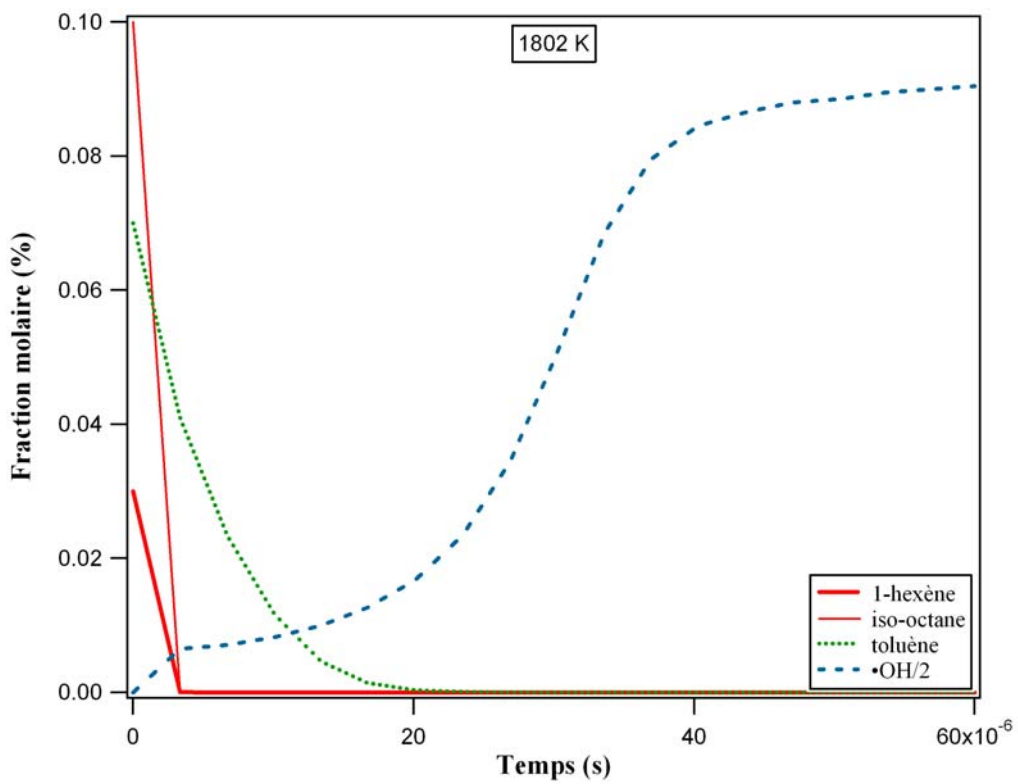
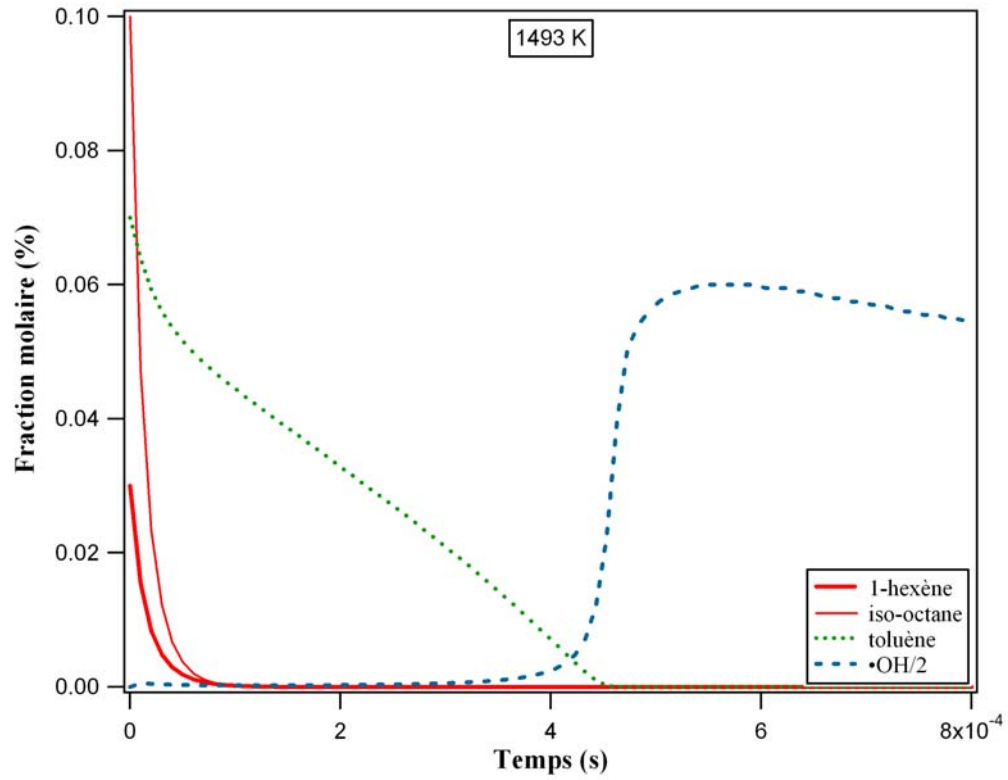


Figure A-III-48 : Profils de concentration des réactifs en fonction du temps pour le mélange iso-octane/toluène/1-hexène 50/35/15 à 1493 et 1802 K.

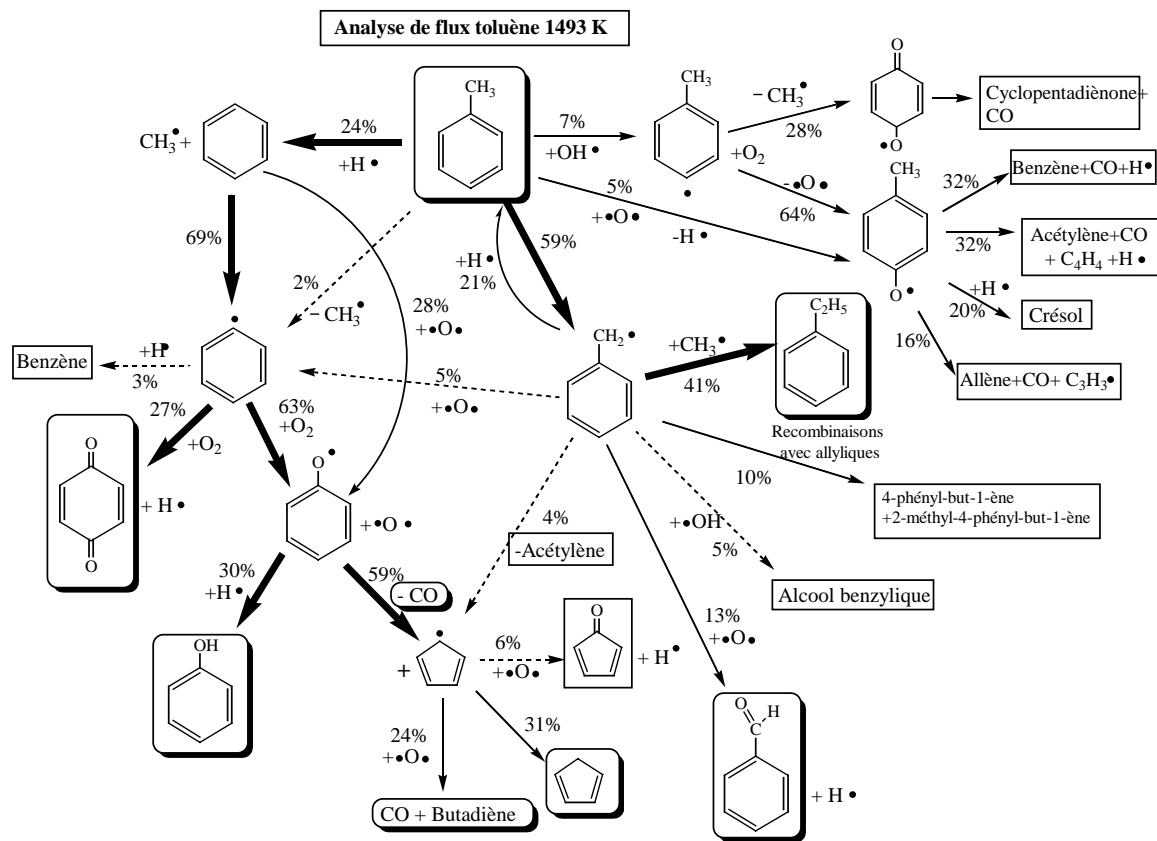


Figure A-III-49 : Analyse des flux de consommation du *toluène* à 1493 K dans le mélange ternaire.

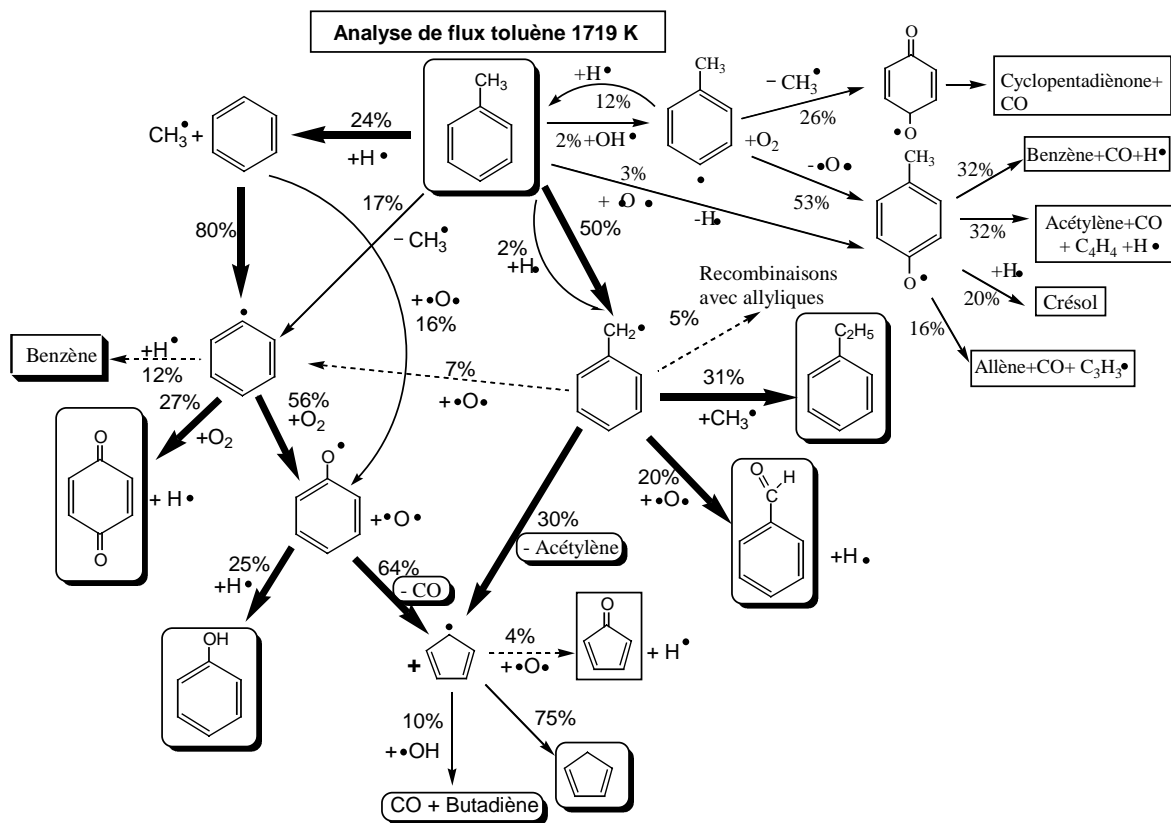


Figure A-III-50 : Analyse des flux de consommation du *toluène* à 1719 K dans le mélange ternaire.

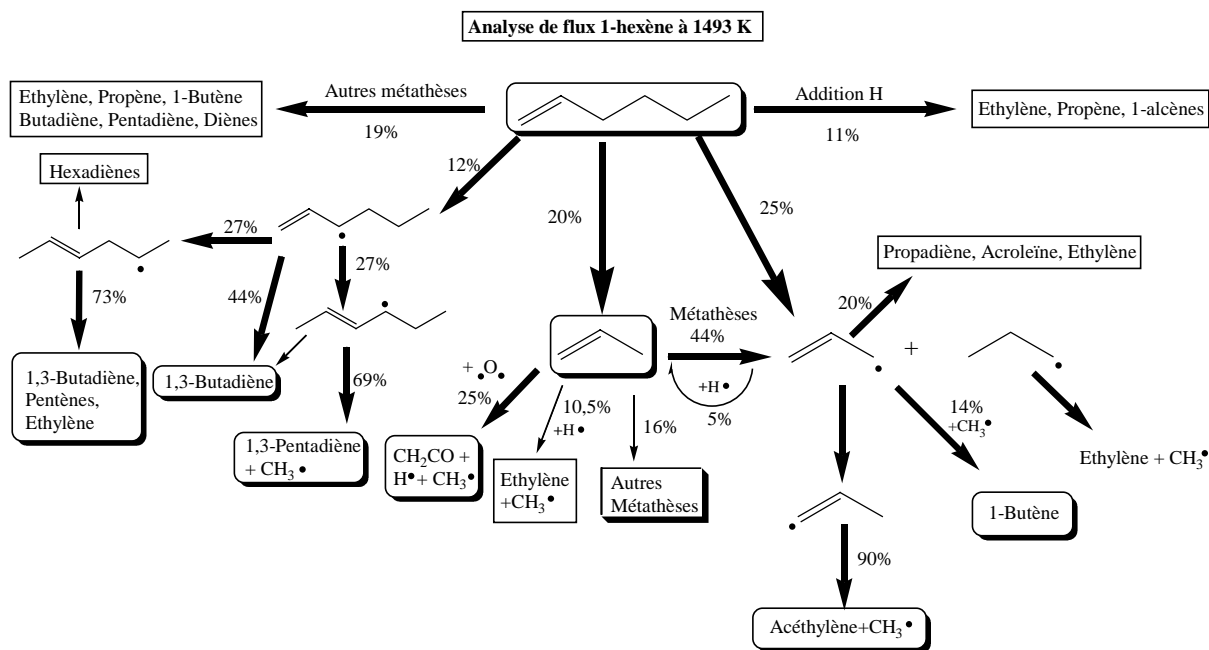


Figure A-III-51 : Analyse des flux de consommation du 1-hexène à 1483 K dans le mélange ternaire.

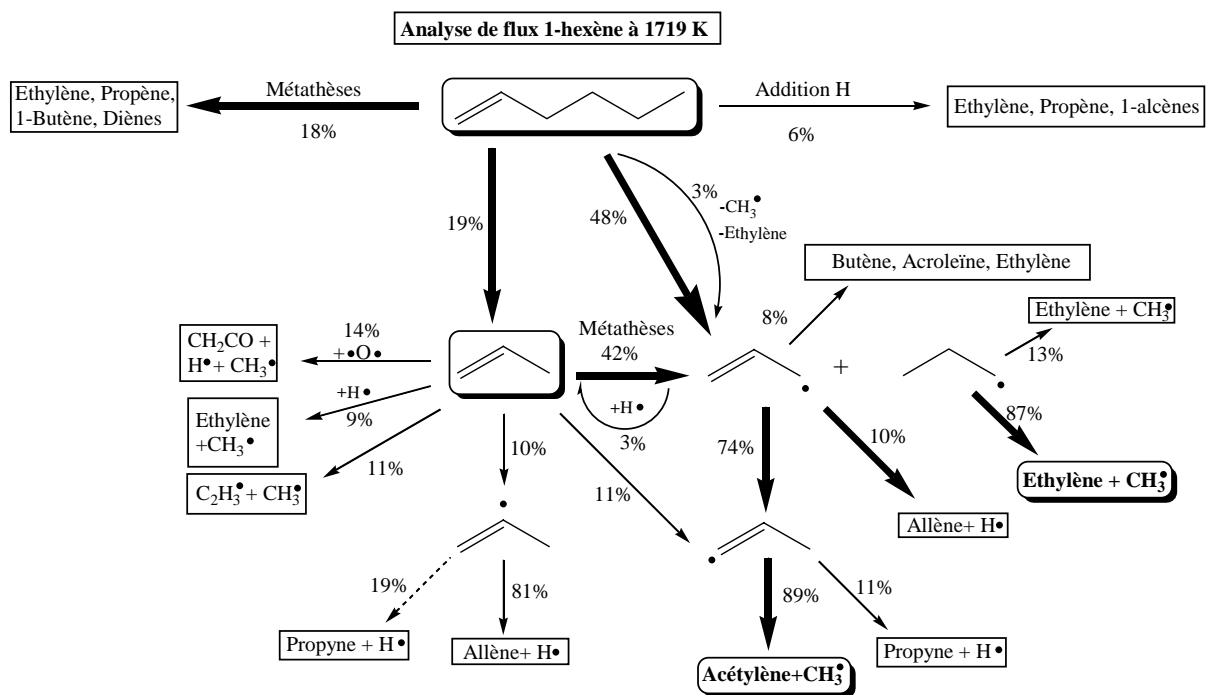


Figure A-III-52 : Analyse des flux de consommation du 1-hexène à 1719 K dans le mélange ternaire.

